

307.226

IV⁹

MAGYAR

33
1985
FIZIKAI FOLYÓIRAT

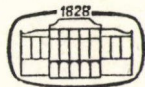
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXXIII. KÖTET

1. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1985

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Turchányi György egyetemi tanár
Bifizikai Intézet
1444 Budapest VII., Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 120 Ft, Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest, V., Alkotmány utca 21, (pénzforgalmi jelzőszámunk 215—11 488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218—10 990 útján eszközölhetők).

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

FOTONKELTÉS A HIGGS-BOZON BOMLÁSAIBAN*

TORMA TIBOR
ELTE Számítóközpont

TARTALOMJEGYZÉK

1. Bevezetés	1
2. A WS modell áttekintése	3
2.1. Mértékelméletek	3
2.2. Spontán sértett szimmetriák	5
2.3. A Higgs jelenség és az egyesített mértékelméletek	6
2.4. Renormálhatóság	7
2.5. Részecsketerek, kölcsönhatások	9
2.6. Gráfszabályok	14
3. A WS modell kísérleti helyzete	17
4. A Higgs szektor	22
5. Tömegkorlátok a Higgs részecskére	27
5.1. Felső korlátok	27
5.2. Alsó korlátok és kozmogóniai vonatkozások	28
6. Higgs keltés és bomlás	29
6.1. $H \rightarrow Vff$	32
7. Fotonok H bomlásban	34
7.1. A folyamatok áttekintése	35
7.2. $H \rightarrow ff\gamma$	37
7.3. $H \rightarrow WW\gamma$	42
7.4. $H \rightarrow ZZ \rightarrow X\gamma$	46
7.5. Fotonspektrum	48
7.6. Kontakt csatolás $H^+ \rightarrow H^0 W^- \gamma$ és $H^0 \rightarrow H^+ W^- \gamma$	51
8. Összefoglalás	54
9. Függelék	55
9.1. Jelölésrendszer	55
9.2. Gráfszabályok	55
9.3. Polarizációs vektorok	59
9.4. Háromrészecskés fázistér	60
Köszönetnyilvánítás	61
Irodalom	61

1. BEVEZETÉS

A gyenge kölcsönhatások leírására már a harmincas évektől kísérletileg jól igazolható elmélet áll rendelkezésre — a Fermi-féle négyfermion-kölcsönhatás. Ennek az elméletnek gyenge pontja, hogy nem renormálható, és így nagy energián nyilvánvalóan lehetetlen eredményt szolgáltat. Például az $e^+e^- \rightarrow \nu_e \bar{\nu}_e$ szórás esetén a hatáskeresztmetszet aszimptotikus viselkedése

$$\sigma \sim s^{-1/2}$$

* Érkezett 1983. nov. 21. Egyetemi doktori értekezés.

már 300 GeV körül sérti az unitaritást. Mivel a jelenlegi kísérleti lehetőségek már lassanként megközelítik ezt a határt, sürgőssé vált renormálható elmélet kidolgozása. A Fermi-féle elméletnek alacsonyenergiás közelítésben érvényben kell maradnia; annak vektoráram-axiálvektoráram szerkezete vektoriális közbülső részecskék jelenléte utal.

A renormálhatóság kritériumának alkalmazása a figyelmet a mértékterekre fordította. A kvantumelektrodinamikához hasonlóan a mértéktranszformáció segítségével csökkenteni lehet a divergenciák mértékét. Az első nem ábeli mértékcsoporthoz épített elméletet *Yang és Mills* [1] javasolta 1954-ben. Ebben az elméletben a mértékcsoporthoz $SO(3)$, a fellépő 3 mértéktér tömeg nélküli vektorbozon. Ez az elmélet renormálható volt, de a valóságban nem ismerünk csak egy tömeg nélküli vektorrészecskét.

A spontán szimmetriasértésnek a mértékterekre való alkalmazása lehetővé tette ennek a problémának a megoldását. Így a mértékterek a spontán sérülésnek megfelelően tömeget kaptak, és őket azonosítani lehetett a fotonnal, ill. a közbülső bozonokkal. Ezzel lehetőség nyílt az elektromágneses és gyenge kölcsönhatások egyesítésére.

A közbülső bozon elmélet egyszerű magyarázatot ad a gyenge kölcsönhatások gyengeségére: a közbülső bozon propagátornevezők minden folyamatot elnyomnak. A keltési küszöbük (70–100 GeV) felett azonban a gyenge folyamatok az elektromágnesekhez hasonló csatolási állandóval rendelkeznek, így azok egyesítése nyilvánvaló lépés.

Az egyesített mértékelméletekre ma már nagyszámú modellt dolgoztak ki. Ezek különböznek a mértékcsoporthoz, az egyes fizikai tereknek megfelelő reprezentációban, a szimmetriasértő terekben és azok potenciáljában, és így általában különböző számú új részecskét jósolnak meg. Jelenleg a kísérletek dönteni látszanak az eredeti Weinberg—Salam modell $SU(2) \times U(1)$ szerkezete és a W és Z közbülső bozonok mellett, valamint szimmetriasértést okozó Higgs-terek dublett szerkezete mellett. E dublettek számát azonban nem kötik meg. A Weinberg—Salam-modell egyik legnagyobb eredménye a semleges gyenge áramok megjósolása, melynek szerkezetét (azaz a Z csatolási állandóit) is helyesen jósolja meg.

Az elektromágneses és gyenge kölcsönhatások egyesítése feltárja az erős kölcsönhatással való egyesítés távlatait is. Az ilyen modellek egyelőre túl határozatlanok és túl sok új részecskét jósolnak.

A Weinberg—Salam-modell igazolása egyelőre közvetett módon, az áramok szerkezetének vizsgálatával történik. A teljes igazoláshoz a következőkre van szükség:

1. W és Z felfedezése. Pl. az e^+e^- tárológyűrűkben történhet, GeV energián. A 45 GeV-os PETRA energián az $e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-$ folyamatban a Z/γ interferenciatag előre-hátra asszimmetriájában a Z rezonancia felszálló ága már mérhető lesz. Jelenleg $p\bar{p}$ ütközésben látják W -t és Z -t.

2. A Higgs szektor szerkezetének tisztázása és a Higgs bozon(ok) tömegének meghatározása. Erre a részecskére a spontán szimmetriasértés létrehozása és az alacsonyabb fokú divergenciák eltávolítása végett egyaránt szükség van.

3. Az elméletben szereplő csatolási állandók értékének meghatározása. Ezeknek az elmélettel egyező volta igazolja végül is a mértékinvariancia érvényességét.

Az említett három feltétel együttes igazolása szükséges az elmélet bizonyításához. A Higgs részecske megtalálása igen nehéz feladat. Ennek az az oka, hogy egyrészt az elmélet a részecske tömegéről lényegében semmit sem tud mondani, más-

részt, hogy a Higgs csatolási állandója a stabil — és így kis tömegű — részecskékhöz igen kicsi. A nehéz kvarkokhoz való erősebb csatolódás miatt multihadron végállapotok várhatók, és így nehéz Higgs jelet találni a végállapotban. Csak a W , ill. Z tömegnél lényegesen nehezebb Higgs esetén kapunk jelentős csatolási állandót (HWX , HZZ).

A Higgs részecske keltési és bomlási folyamatait az irodalom részletesen tárgyalja. Leginkább e^+e^- ütközésekben, az $e^+e^- \rightarrow ZH$ és $e^+e^- \rightarrow (q\bar{q}) \rightarrow HX$ folyamatokban lehetne kimutatni. A Higgs bomlásai közül mindig a lehetséges legnagyobb tömegű fermion, ill. nehéz vektorbozon párra való bomlása várható. A Higgs részecske bomlását általában fotonok kisugárzása is kísérheti. Kis foton energiákra a fotonkeltés hatáskeresztmetszete elég nagy, és csak a kisugárzott részecskétől függ (fékezési sugárzás). 1 GeV feletti energiákon már alkalmazható a perturbációs számítás az infravörös divergenciák miatti levonások alkalmazása nélkül. Ekkor a parciális bomlási szélességet növelheti az, hogy a lefutó töltött részecske propagátora elég kicsi lehet. Amint számításaink mutatják, a folyamatokat általában 1—20%-os valószínűséggel fonsugárzás kíséri, amit a folyamatok kísérleti vizsgálatokor tekintetbe kell venni. Megállapítottuk továbbá, hogy ha csak a fonspektrumot vizsgáljuk, akkor 200 GeV feletti Higgs-tömeg esetén tisztán a fonspektrumot vizsgálva 3 GeV körül erős minimum található, ami a Higgs csatolási állandók arányán keresztül jellemzi a Higgs részecskét. Megvizsgáljuk továbbá a két dublettes Weinberg—Salam-modellben jellegzetes $H^+HW^- \gamma$ kontakt csatolás kimutathatóságát, és azt kísérletileg — megfelelő m_H tartományok esetén — észlelhetőnek találtuk.

A munka felosztása a következő: először összefoglaljuk a WS modell elméleti alapjait, majd ismertetjük a rá vonatkozó kísérletek állását. Az 1 és 2 dublettes Higgs szerkezetnek megfelelően felírjuk a csatolásokat. Összefoglaljuk a Higgs részecskére vonatkozó tömegkorlátokat és a keltési és bomlási folyamatokat, majd megvizsgáljuk azokat a folyamatokat, ahol a Higgs bomlása közben fotonok keletkezhetnek. Az irodalomjegyzékben felsoroljuk mindazon cikkek teljes listáját, amelyek 1981 végéig a Higgs keltési és bomlási folyamatokról szólnak.

Az általunk végzett számításokat és eredményeit a 6.1 pont és a 7. rész tartalmazza. Ezt az Összefoglalás tárgyalja áttekintően.

2. A WEINBERG—SALAM-MODELL ÁTTEKINTÉSE [3, 4]

2.1. Mértékelméletek

Az alábbi tárgyalás a 2. részben nem törekszik teljességre, az elméletet csak szemléltetni kívánja. A részletes tárgyalás megtalálható a magyar nyelvű irodalomban [4]. Teljességre csak a gráfszabályok felírásánál törekedtünk.

Az eddigi egyetlen sikeres dinamikai elmélet, a kvantum-elektrodinamika renormálhatóságában nagy szerepe van a fotontér mértékinvarianciájának. Ez az invariancia már a kvantummechanika idejéből ismert, mint: a Maxwell-egyenletek invarianciája. A globális invarianciának lokális invarianciává való általánosításával alkotta meg Einstein az általános relativitáselméletet. A mértékterek elméletének megfogalmazását Yang és Mills [1] végezték el.

Mint ismeretes, a mértéktranszformációkkal szembeni invariancia közvetlen összefüggésben van a fotontömeg eltűnésével; ezért ez az elmélet további módosítás nél-

kül — tömeg nélküli vektorrészesekék hiányában — nem volt alkalmazható. A spon-tán szimmetriasértés mutatta meg, hogyan lehet tömeges mértéktereket bevezetni.

A mértékelméletek alapgondolata a következő: valamely transzformációcsoport (G) legyen a valóság egy folytonos szimmetriája. Ekkor általában a Lagrange-sűrű-ség nem lesz invariáns azokra a transzformációkra, melyek a tereket különböző téridő-pontokban különbözőképpen transzformálják. A G transzformációcsoport elemeit (pl. ha az összefüggő, de nem feltétlenül kommutatív) a Lie-algebra elemeivel koordinátázhatjuk:

$$G \ni g \leftrightarrow \omega_j : g = e^{\omega_j t_j}. \quad (2.1)$$

Ekkor a deriváltat nem tartalmazó tagok a Lagrange-sűrűségben invariánsak lesz-nek a

$$e^{\omega_j(x) \cdot t_j} \in G_x, \quad \omega_j(x) : \mathbf{R}_1^4 \rightarrow \mathbf{R} \quad (2.2)$$

ún. lokális gauge-transzformációra is. Ezt az invarianciát elrontják a deriváltak; ugyanis megjelenik $\partial_\lambda \omega_j(x)$ is. Az invariancia helyreállítása a mértékterek segítségével lehetséges. A deriváltak helyére kovariáns deriváltat helyettesítünk, amely egy megfelelően transzformálódó vektortér tartalmaz; a kovariáns derivált ugyanúgy transzformálódik G_x hatására, mint a derivált G hatására; ez biztosítja \mathcal{L} invarianciá-ját G_x -szel szemben. A kovariáns derivált

$$D^\lambda = \partial^\lambda + g_j \cdot A_j^\lambda \cdot t_j. \quad (2.3)$$

Ekkor D^λ kovarianciájához, azaz

$$e^{i\omega_j(x) \cdot t_j} \cdot D^\lambda \cdot e^{-i\omega_j(x) \cdot t_j} = D^\lambda \quad (2.4)$$

-hoz az szükséges, hogy A_λ transzformációja

$$\mathbf{A}_\lambda \rightarrow \mathbf{A}_\lambda + \frac{1}{g} \cdot \partial_\lambda \boldsymbol{\omega} + \mathbf{A}_\lambda \times \boldsymbol{\omega} + 0(\boldsymbol{\omega}) \quad (2.5)$$

$$\mathbf{B}_\lambda \rightarrow \mathbf{B}_\lambda + \frac{2}{g} \cdot \partial_\lambda \boldsymbol{\omega} + 0(\boldsymbol{\omega})$$

alakú legyen. Látható ekkor, hogy a Lie-csoport minden egyparaméteres részcsoport-jának megfelel egy vektortér; és G alatt ezek G adjungált reprezentációjának meg-felelően transzformálódnak. (2.5) utolsó tagjában f_{jkl} a Lie-algebra struktúraállandóit jelenti. Ez a kovariancia közvetlen számítással belátható abban az esetben, ha a g_j értékek azonosak mindazon generátorokra, melyek egymással nem kommutálnak.

A fenti eljárás minimális módon bevezetett vektorbozon kölcsönhatásoknak felel meg, és alkalmazható mind fermionterek, mind bozonterek esetében, t_j megfelelő értékének behelyettesítésével. A hátralevő feladat a vektorterek kinetikus energiájá-nak invariánssá tétele. Ehhez a foton esetében szereplő

$$F_{\lambda\mu}^j = \partial_\lambda A_\mu^j - \partial_\mu A_\lambda^j, \quad \mathcal{L}_{\text{kim}} = -\frac{1}{4} F_j^{\lambda\mu} F_{\lambda\mu}^j \quad (2.6)$$

tenzor helyére kovariáns

$$G_{\lambda\mu}^j = F_{\lambda\mu}^j - \frac{g_j}{2} \cdot f^{jkl} \cdot (A_\lambda^k A_\mu^l - A_\lambda^l A_\mu^k) \quad (2.7)$$

tenzort kell írni. Ez $F_{\lambda\mu}^j$ -től csak nem kommutatív mértékcsoport esetén tér el, ami várható is volt, tekintettel arra, hogy kommutatív mértékcsoport esetén a (2.5)-beli f_{jkl} struktúraállandók eltűnnek.

A mértékelméletek gyakorlati alkalmazását nehezíti az a tény, hogy keletkezett néhány tömeg nélküli $A_\mu^j(x)$ vektorrészcseke. A kísérleti kimutatás céljából igen alkalmasak lehetnek a $G_{\lambda\mu} G^{\lambda\mu}$ által bevezetett 3 és 4 vektorbozon csatolások.

2.2. Spontán sértett szimmetriák [5]

A természeti törvények valamely szimmetriája nem vonja maga után sem a fizikai valóság, sem az alapállapot (vákuum) szimmetriáját. A gömb alakú Föld felszínén mozgó emberiség számára a felszínen való tartózkodás az alapállapot; és ezen alapállapotokból végtelen sok van. Valamely kiválasztott alapállapot kiválasztása elfedheti előttünk a Föld gömbszimmetriáját, és bizonyos erőfeszítésre volt szükség, hogy azt felfedezzük. Nem csoda ezért, hogy a gyenge kölcsönhatás mélyén meghúzódó spontán sértett szimmetriát nehéz volt felfedni.

Spontán szimmetriasértés lép fel, ha valamely fizikai rendszer alapállapota elfajult, és a szimmetria ezen alapállapotokat egymás között transzformálja. Ennek egyszerű esetét jelenti egy két η és φ skalár térből álló elmélet, melyben a Lagrange-sűrűség

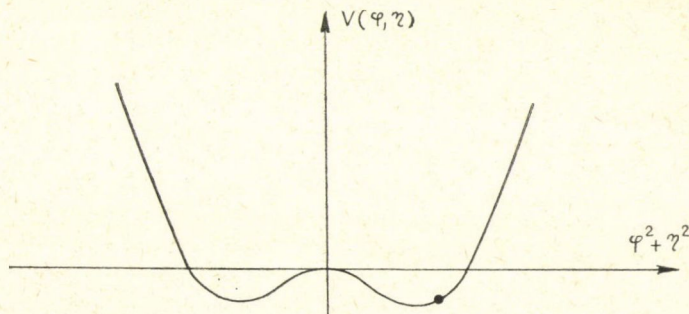
$$\mathcal{L} = -2r^2 \cdot B \cdot (\varphi^2 + \eta^2) + B \cdot (\varphi^2 + \eta^2)^2 + \frac{1}{2} (\partial\varphi)^2 + \frac{1}{2} (\partial\eta)^2 \quad (2.8)$$

alakú. Ez a Lagrange-sűrűség spontán szimmetriasértő, ugyanis (2.8) akkor veszi fel minimális értékét, ha

$$\varphi^2 + \eta^2 = r^2 \quad (2.9)$$

és a potenciálnak (és \mathcal{L} -nek) szimmetriája a φ, η síkon való elforgatás. $r^2 > 0$ esetén ez az elforgatás nem hagyhatja fixen φ -t és η -t.

Mivel a φ, η síkban a koordinátázást tetszőlegesen végezzük, fel fogjuk tételezni, hogy a valódi alapállapot a $\varphi = r$ és $\eta = 0$ értékeknek felel meg. Ez a terek kvantálása után a $\langle 0|\varphi|0\rangle = r$; $\langle 0|\eta|0\rangle = 0$ feltételeket jelenti. Bevezetjük ezzel a $\pi = \varphi - r$



1. ábra

eltolt teret; így már $\langle 0|\pi|0\rangle=0$ lesz; a fizikai π és η terek a vákuumtól való „távolságot” (gerjesztést) mérik. Ezzel kifejezve a Lagrange-sűrűség

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}(\partial\pi)^2 + \frac{1}{2}(\partial\eta)^2 + B \cdot (\pi^2 + \eta^2 + 2r \cdot \pi)^2. \quad (2.10)$$

Ennek a kifejezésnek nincs η -ban kvadratikusan tagja, azaz az η tér elvesztette tömegét. Ez megjelenése az általános Goldstone-tételnek: spontán szimmetriasértő elméletben annyi tömeg nélküli bozon szerepel, ahány paraméteres a szimmetria.

A spontán szimmetriasértés fent vázolt elmélete alkalmas eszköz arra, hogy a részecskék tömegspektrumáról mondjon valamit, viszont a feltétlenül elengedhetetlen Goldstone-bozon kísérleti szempontból semmilyen részecskének sem felel meg. Ezt a problémát a mértéktranszformációk oldhatják meg, kitranszformálva az elméletből a felesleges részecskéket.

2.3. A Higgs jelenség és az egyesített mértékelméletek [3, 6]

A mértékelmélet és a spontán szimmetriasértés elmélete kölcsönösen képes megoldani egymás nehézségeit: a spontán szimmetriasértéssel módosulnak a tömegek, s így eltüntethetők a tömeg nélküli vektorbozonok, a mértékelméletek mértékszabadsága segítségével ki lehet transzformálni az elméletből a nemkívánatos Goldstone-bozonokat.

Az elméletet az egyparaméteres Lie-csoport esetén fogjuk szemléltetni. Legyen adva egy komplex vektortér

$$\mathcal{L} = \bar{\Phi} \vec{\partial}^\lambda \cdot \vec{\partial}_\lambda \Phi - V(\Phi), \quad (2.11)$$

melynek $U(1)$ szimmetriája a

$$e^{i\omega t} \cdot \Phi = e^{-i\omega} \cdot \Phi \quad (t_\Phi = -i) \quad (2.12)$$

transzformáció. Ezt a transzformációt az előző fejezetben mondottak szerint lokálissá terjesztjük ki:

$$\partial^\lambda \rightarrow \partial^\lambda - igA^\lambda, \quad \delta A^\lambda = -\frac{1}{g} \cdot \partial^\lambda \omega(x) \quad (2.13)$$

$$\mathcal{L} = \bar{\Phi} \cdot (\vec{\partial}^\lambda + igA^\lambda) \cdot (\vec{\partial}_\lambda - igA_\lambda) \Phi - V(\Phi).$$

Ha most a V potenciál spontán szimmetriasértő, például

$$V = \lambda \cdot (\bar{\Phi}\Phi)^2 - \mu^2 \cdot \lambda \cdot (\bar{\Phi}\Phi) + \text{const} \quad (2.14)$$

akkor a terek zérus vákuumértékének biztosításához eltolt tereket vezetünk be:

$$\Phi = \mu + H + ih. \quad (2.15)$$

Ekkor a mértéktér tömeget kap, a Lagrange-sűrűség

$$\mathcal{L} = (\mu + H - ih)(\partial^\lambda + igA^\lambda) \cdot (\partial_\lambda - igA_\lambda) \cdot (\mu + H + ih) - \lambda \cdot (H^2 + h^2 + 2\mu H)^2 \quad (2.16)$$

alakú lesz. Látható, hogy itt h tömeg nélküli Goldstone-bozon. Most megmutatjuk, hogy a mérték megfelelő választásával h kitranszformálható az elméletből. Ehhez elő-

ször kanonikus transzformációt hajtunk végre:

$$\mu + H + ih \rightarrow (H + \mu)e^{i\xi}. \quad (2.17)$$

Ekkor az új $H + u$ méri a nem stabil sértett vákuumtól való távolságot, és így H vákuumátlag 0 lesz. A mérték-transzformáció alakja a reprezentációban

$$\begin{aligned} \omega: H &\rightarrow H \\ \xi &\rightarrow \xi + \omega(x) \quad A_\lambda \rightarrow A_\lambda - \frac{1}{g} \partial_\lambda \omega(x) \end{aligned} \quad (2.18)$$

és most végezzük el a

$$\mathcal{L} = (H + \mu) \cdot e^{-i\xi} (\vec{\partial}^2 + igA^\lambda) \cdot (\vec{\partial}_\lambda - igA_\lambda)(H + \mu)e^{i\xi} \quad (2.19)$$

Lagrange-függvényen az

$$\begin{aligned} \omega &= -\xi(x) \\ H &\rightarrow H, \quad \xi \rightarrow 0, \quad A_\lambda \rightarrow A'_\lambda = A_\lambda + \frac{1}{g} \cdot \partial_\lambda \xi(x) \end{aligned} \quad (2.20)$$

mértéktranszformációt. Ha most \mathcal{L} -et a H és A' terekkel fejezzük ki, akkor

$$\mathcal{L} = (H + \mu) \cdot (\vec{\partial}^2 + igA^\lambda) \cdot (\vec{\partial}_\lambda - igA_\lambda)(H + \mu) - \lambda(H^2 + 2\mu H)^2 \quad (2.21)$$

visszkapjuk (2.16)-ot, csak h eltűnt.

Ezt a jelenséget hívjuk Higgs-jelenségnek. A spontán sértett mértékelméletekben mindig választható olyan mérték, amelyikben a Goldstone-bozonok eltűnnek. Az általuk képviselt szabadsági fok (2.20) szerint átadódik a tömeget szerző vektorbozon longitudinális szabadsági fokába.

Foglaljuk össze most a helyzetet a gyenge kölcsönhatás szempontjából. Keletkezik annyi darab vektorrészcseke, ahány paraméteres a szimmetriacsoport. Ezek tömeget kapnak, amennyiben a nekik megfelelő szimmetriacsoport spontán sérül, nyilván a foton esetében a töltéstranszformáció nem sérül. Az eredeti Lagrange-sűrűségnek legalább ugyanennyi skalárteret kell tartalmaznia, ha ennél többet tartalmaz, az már bent marad az elméletben, de tömege bármekkora lehet (Higgs). A fermionok tömeget kaphatnak, ha a spontán sértés „előtt” csatolódnak a skalárterekhez; a csatolásuk és a fermiontömegek arányosak lesznek. Eredetileg a fermionok is tömeg nélküliek voltak, a mérték invariancia következtében.

2.4. Renormálhatóság

A Fermi-féle négyfermion-elmélet renormálhatatlansága miatt már kb. 300 GeV energia körül az uniteritással ellentétes eredményeket ad. A spontán sértett mértékelméletek legvonzóbb tulajdonsága a renormálhatóságuk, amelynek alapján talán zárt elméletet lehet kiépíteni.

A renormálhatóságnak a csatolási állandók dimenziója szerinti analízise a Higgs-vektorbozon csatolások esetén a tömeg dimenziójú csatolási állandó miatt azt mutatná, hogy az elmélet renormálhatatlan. A valóságban figyelembe kell venni, hogy

a mértéktranszformáció miatt az egyes fellépő divergenciák egymást kiejthetik. A helyzet analóg a kvantumelektrodinamikával: ott a másodfajú mértéktranszformációkból következő Ward-identitás felhasználásával tudjuk bizonyítani, hogy a töltés és tömeg renormálással minden rendben eltűnnek a divergenciák.

A nem abeli mértékelméletek esetén fellépő jelenséget az alábbiakkal lehet megmutatni. Ha olyan mértéket használunk, amelyben nem lépnek fel szellemek, akkor a W, Z bozonok propagátorai

$$\left(g_{\lambda\mu} - \frac{k_\lambda k_\mu}{M^2}\right) \cdot \frac{1}{k^2 - M^2} \quad (2.22)$$

alakúak lesznek. Ezeknek nagy k esetén a QED -beli propagátorokhoz képest egy $k_\lambda \cdot k_\mu$ szorzójuk van. Látható, hogy ezt a longitudinális részecskék okozzák, amelyek végső soron a Goldstone-bozonok kitranszformálásával kerültek be az elméletbe. Ebben az (unitér-) mértékben a renormálhatóság csak úgy állhat fenn, ha ezek a divergenciák nagy k -ra egymást kiejtik.

Ha most ugyanazt az S -mátrixelemet számítandó olyan mértéket választunk, ahol a propagátorok

$$\left(g_{\lambda\mu} - \frac{k_\lambda k_\mu}{k^2}\right) \cdot \frac{1}{k^2 - M^2} \quad (2.23)$$

alakúak (renormálható mérték), akkor skalár töltött és semleges szellem részecskék jelennek meg. A propagátor viselkedése viszont nagy k -ra azonos a fotonpropagátoréval, és mivel a két mértéknek azonos S -mátrixelemet kell szolgáltatnia, látjuk, hogy az unitér mértékben a divergenciáknak ki *kell* esniük.

A renormálást itt nem végezzük el, megemlítjük csupán, hogy annak legegyszerűbb módja a tér dimenziószáma szerinti folytatással történik. Ekkor a divergenciák $n=4$ -nél pólusként jelennek meg, amelyek egyértelműen eltávolíthatók [7].

A csatolási állandókba és tömegekbe nem beépíthető divergenciák kölcsönös kiesése szigorú feltételeket ró az elméletre. Ezek egyike az, hogy az unitér mértékben is kell maradnia egy Higgs bozonnak, melynek a fermionokhoz való csatolódásának alakja is rögzített és a csatolási állandó arányos a fermion tömegével.

Ezt legegyszerűbben az $e^+e^- \rightarrow ZZ$ szórás aszimptotikus viselkedésén láthatjuk be [8].

Összehasonlításképpen a QED -beli $e^+e^- \rightarrow \gamma\gamma$ szórás hatáskeresztmetszete

$$\frac{d\sigma}{dt} \sim \frac{\alpha}{s^2} \quad s \sim t \rightarrow \infty \quad (2.24)$$

dimenzionális megfontolásokból. Ugyanez nem érvényes a ZZ végállapotra, ugyanis ott még m_Z dimenzionális paraméter is rendelkezésre áll, és ez a polarizációs vektorok összegzésekor (bármely mértékben)

$$\sum \varepsilon^\lambda \varepsilon^\mu = -\left(g^{\lambda\mu} - \frac{k^\lambda k^\mu}{m_Z^2}\right) \quad (2.25)$$

egy $s \approx t$ -vel arányos tagot hoz be. A problémát itt is a longitudinális Z bozon okozza. Felírjuk ezért longitudinális Z -kre a szórás hatáskeresztmetszet axiálvektor

csatolásból adódó részét másodrendben

$$\mathfrak{M}_{\text{axiál}} = -\frac{g_A^2 + g_V^2}{16} \cdot \tilde{v} \left(\gamma_\lambda \gamma^5 \frac{1}{f_1 - k_1 - m_j} \gamma_\mu \gamma^5 + \gamma_\mu \gamma^5 \frac{1}{f_2 - k_2 - m_j} \gamma_\lambda \gamma^5 \right) u$$

$$\frac{d\sigma}{dt} = \frac{1}{512\pi} \cdot \frac{(g_A^2 + g_V^2)^2}{s^2} \cdot \frac{m_e^2 \cdot s}{m_z^2} \quad (s \approx t \rightarrow +\infty). \quad (2.26)$$

Látjuk, hogy nagy st -nél egy extra s faktor van jelen. Ennek eltüntetése úgy lehetséges, hogy egy újabb skalár H bozont vezetünk be a

$$\mathcal{L}_H = C_f \cdot H \bar{f} f + C_z \cdot H Z^\lambda Z_\lambda \quad (2.27)$$

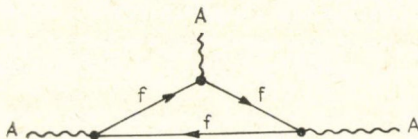
Lagrange függvénnyel. Ekkor a divergencia eltűnésének a feltétele

$$C_e \cdot C_z = -\frac{1}{2} (g_A^2 + g_V^2) \cdot m_e. \quad (2.28)$$

A Higgs-fermion csatolás éppen a fermiontömeggel arányos.

További megszorítást adnak az elméletre a háromszög-gráfok. Jackiw kimutatta hogy általános esetben fermionok jelenlétében nem lehet megmaradó és mértékinvariáns axiálvektoráramot definiálni.

Emiatt ekkor a



gráfok járuléka nem regularizálható úgy, hogy érvényben maradjon minden Ward-identitás, végül is a γ^5 -tel arányos tagok e gráfban végtelenek maradnak. A divergenciát úgy lehet elkerülni, hogy megköveteljük, hogy az egyes fermionterek járulékaik ejtsék ki egymást. Ennek feltétele [3], hogy ha ψ jelöli az összes fermionterek oszlopvektorát, és az $A_{a\mu}$ vektorterekhez a csatolás alakja

$$\bar{\psi} \cdot \gamma^\mu \cdot \Gamma_a \cdot \psi \cdot A_{a\mu}, \quad (2.29)$$

akkor érvényes legyen

$$Sp(\gamma^5 \Gamma_a \cdot [\Gamma_b; \Gamma_c]_+) \equiv 0. \quad (2.30)$$

Ez a Weinberg—Salam modellben arra vezet, hogy az összes fermion töltésének összege (a színekre is összegezve) zérus legyen. Ez fermion generációként teljesül.

2.5. Részecsketerek, kölcsönhatások

Az elektromágneses és gyenge kölcsönhatások Weinberg—Salam-féle egyesített modelljének alapvető vonása a minimalitás. Ennek megfelelően a mértékcsoport $SU(2) \times U(1)$, a leptonikus izospin és hipertöltés csoport. Az egyes terek e csoport irreducibilis reprezentációi szerint transzformálódnak.

A mértékcsoport transzformációt a Higgs-skalár potenciális energiája spontán sérti. Nem sérülő szimmetria marad a töltéstranszformáció. Ennek megfelelően az elméletben a fermionokon kívül a tömeg nélküli foton, egy töltött (W) tömeges, és egy semleges tömeges (Z) mértéktér lép fel.

A fermionok az $SU(2)$ csoport dublett, ill. sziglett reprezentációjához tartoznak. A három fermion generáció három balkezes dublettet és hat jobbkezes sziglettet alkot, további fermion generációkra ez könnyen általánosítható. Így

$$F_L = \frac{1+\gamma^5}{2} \cdot \begin{pmatrix} F_t \\ F_b \end{pmatrix}, \quad F_R^t = \frac{1-\gamma^5}{2} \cdot (F_t), \quad F_R^b = \frac{1-\gamma^5}{2} \cdot (F_b), \quad (2.31)$$

ahol az egyes dublettek jelentése

$$\begin{pmatrix} F_t \\ F_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \nu_e \\ e \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \nu_\mu \\ \mu \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \nu_\tau \\ \tau \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} c \\ s \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} t \\ b \end{pmatrix}. \quad (2.32)$$

Ha valamelyik neutrínó tömege zérus és balkezes, akkor az R sziglett egyszerűen elhagyandó. A jobb- és balkezes állapotok különböző reprezentációba kerülése nem sérti a Lorentz-invarianciát, ugyanis a fermionok 0 tömeggel indulnak.

Az $SU(2) \times U(1)$ egyszeresen összefüggő Lie-csoportot az alábbi módon koordinatázzuk:

$$G \ni g = \exp \left[i \left(\omega \tau_0 + \boldsymbol{\omega} \cdot \frac{1}{2} \boldsymbol{\tau} \right) \right]; \quad \tau_0 = 1 \quad \text{és} \quad \boldsymbol{\tau} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i \\ i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (2.33)$$

ahol τ_i a G Lie-algebrájának elemei. A felcserélési relációk:

$$[\tau_0; \tau_j] = 0; \quad \left[\frac{1}{2} \tau_j; \frac{1}{2} \tau_k \right] = i \varepsilon_{jkl} \cdot \frac{1}{2} \tau_l \quad (2.34)$$

és a fermionterek transzformációi

$$F_L \rightarrow \exp i \left[\omega (1-2q_t) + \frac{1}{2} \boldsymbol{\tau} \boldsymbol{\omega} \right]; \quad F_R^t \rightarrow e^{-2iq_t} \cdot F_R^t; \quad F_R^b \rightarrow e^{+2iq_b} \cdot F_R^b, \quad (2.35)$$

ahol q_i jelöli a t , ill. b fermion töltését.

Bevezetünk továbbá egy $SU(2)$ -dublett Higgs-teret is, amely $SU(2)$ normál és pontozott spinorrepresentációjaként is felfogható:

$$\Phi_b = \begin{pmatrix} \Phi_b^1 \\ \Phi_b^2 \end{pmatrix}, \quad \Phi_t = \begin{pmatrix} \Phi_b^{2*} \\ -\Phi_b^{1*} \end{pmatrix}, \quad [\bar{\Phi}_b \Phi_b \equiv \bar{\Phi}_t \Phi_t], \quad (2.36)$$

melynek transzformációja

$$\begin{aligned} \Phi_t &\rightarrow \exp \frac{1}{i} \cdot \left(\omega + \frac{1}{2} \boldsymbol{\tau} \boldsymbol{\omega} \right) \cdot \Phi_t, \\ \Phi_b &\rightarrow \exp i \cdot \left(\omega + \frac{1}{2} \boldsymbol{\tau} \boldsymbol{\omega} \right) \cdot \Phi_b. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Ekkor a Higgs- és fermion-terek között Yukawa-típusú kölcsönhatást vezetve be, az

$SU(2) \times U(1)$ -re invariáns Lagrange-függvény alakja

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \frac{i}{2} \cdot \tilde{F}_L \vec{\partial} \frac{1+\gamma^5}{2} F_L + \frac{i}{2} \sum_{j=b,t} \tilde{F}_R^j \vec{\partial} \frac{1-\gamma^5}{2} F_R^j + \tilde{\Phi}_b \vec{\partial}^\lambda \cdot \vec{\partial}_\lambda \Phi_b - V(\Phi) - \\ & - \sum_{j=b,t} \frac{\sqrt{2} m_j^i}{v} \cdot \left(\tilde{F}_L \cdot \Phi_j \frac{1-\gamma^5}{2} F_R^j + \tilde{F}_R^j \cdot \tilde{\Phi}_j \frac{1+\gamma^5}{2} F_L \right), \end{aligned} \quad (2.38)$$

ahol $V(\Phi)$ a Higgs potenciális energia.

Most kiterjesztjük a mértékinvarianciát lokális invarianciává. Ehhez be kell vezetnünk az A_λ és B_λ mértéktereket, és a deriváltak helyébe a

$$\partial_\lambda \rightarrow D_\lambda = \partial_\lambda - \frac{i}{2} g \mathbf{A}_\lambda \cdot \mathbf{t} - \frac{i}{2} g' B_\lambda \cdot t \quad (2.39)$$

kovariáns deriváltat kell helyettesítenünk (t_i itt a csoport generátorait jelenti). A mértékinvariancia lokális teljesüléséhez az szükséges, hogy az A_λ és B_λ terek transzformációja

$$\delta \mathbf{A}_\lambda = \frac{1}{g} \cdot \partial_\lambda \omega + \mathbf{A}^\lambda \times \omega; \quad \delta B_\lambda = \frac{2}{g'} \cdot \partial_\lambda \omega \quad (2.40)$$

alakú legyen, és hogy az A és B vektorterek kinetikus tagjai is invariánsak legyenek. E feltételeknek tesz eleget a

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \frac{i}{2} \tilde{F}_L (\vec{\partial} - ig \mathbf{A} \tau - ig' \cdot (1-2q_t) \cdot B) \frac{1+\gamma^5}{2} F_L + \frac{i}{2} \sum_{j=b,t} \tilde{F}_R^j (\vec{\partial} + 2ig' B) \frac{1-\gamma^5}{2} F_R^j - \\ & - \frac{\sqrt{2} m_j^i}{v} \cdot \left(\tilde{F}_L \Phi_j \frac{1-\gamma^5}{2} F_R^j + h.c. \right) + \tilde{\Phi}_b \cdot \left(\vec{\partial}^\lambda + \frac{i}{2} g \mathbf{A}^\lambda \tau - \frac{i}{2} g' B^\lambda \right) \times \\ & \times \left(\vec{\partial}_\lambda - \frac{i}{2} g \mathbf{A}_\lambda \tau + \frac{i}{2} g' B_\lambda \right) \Phi_b - V(\Phi) - \frac{1}{4} (\partial^\lambda B^\mu - \partial^\mu B^\lambda) \cdot (\partial_\lambda B_\mu - \partial_\mu B_\lambda) - \\ & - \frac{1}{4} (\partial^\lambda \mathbf{A}^\mu - \partial^\mu \mathbf{A}^\lambda + g \mathbf{A}^\lambda \times \mathbf{A}^\mu) \cdot (\partial_\lambda \mathbf{A}_\mu - \partial_\mu \mathbf{A}_\lambda + g \mathbf{A}_\lambda \times \mathbf{A}_\mu) \end{aligned} \quad (2.41)$$

Lagrange-sűrűség. A vektorrészcskék kinetikus energiáját invariánssá tevő utolsó tagból jellegzetes hármas, ill. négyes vektor csatolásokat kapunk.

A szimmetriát spontán sérti a $V(\Phi)$ potenciál. Ez megvalósulhat például a

$$V(\Phi) = \frac{m_H^2}{2v^2} \cdot (\bar{\Phi}_b \Phi_b)^2 - \frac{m_H^2}{2} \cdot (\bar{\Phi}_b \Phi_b) \quad (2.42)$$

potenciál esetén. Könnyen látható, hogy az alapállapot a $\frac{v}{\sqrt{2}} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ vektor $SU(2) \times U(1)$ által generált pályájának bármely eleme lehet, itt minimális ugyanis V értéke. Bevezetjük ezért a

$$\Phi_b = \left(\frac{G}{\frac{H+ih+v}{\sqrt{2}}} \right); \quad H^* = H; \quad h^* = h \quad (2.43)$$

eltolt tereket, ekkor G , H és h vákuumvárható értéke eltűnik.

A Higgs-tér alapállapotú értéke $\frac{v}{\sqrt{2}} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ alapján megkereshetjük a nem spontán sértett szimmetriát; ez $\langle 0 | \Phi_b | 0 \rangle$ -t nem változtatja meg:

$$t_{EM} = t \cdot \cos \theta_w - t_3 \cdot \sin \theta_w; \quad e = g' \cdot \sin \theta_w = g \cdot \cos \theta_w. \quad (2.44)$$

Ennek megfelelően a vektorterek diagonalizálása:

$$\begin{aligned} W_\lambda &= \frac{A_\lambda^1 - i A_\lambda^2}{\sqrt{2}}; \quad A_\lambda^1 = \frac{\bar{W}^\lambda + W^\lambda}{\sqrt{2}}; \quad Z_\lambda = A_\lambda^3 \cos \theta_w + B_\lambda \sin \theta_w; \\ A_\lambda^3 &= Z_\lambda \cos \theta_w - A_\lambda \sin \theta_w; \\ \bar{W}_\lambda &= \frac{A_\lambda^1 + i A_\lambda^2}{\sqrt{2}}; \quad A_\lambda^2 = \frac{\bar{W}^\lambda - W^\lambda}{\sqrt{2}i}; \quad A_\lambda = B_\lambda \cos \theta_w - A_\lambda^3 \sin \theta_w; \\ B_\lambda &= A_\lambda \cos \theta_w + Z_\lambda \sin \theta_w. \end{aligned} \quad (2.45)$$

A fenti összefüggéseket behelyettesítjük (2.38)-ba. Az így kapott Lagrange-sűrűség meg fogja adni az elméletben szereplő összes kölcsönhatást.

A kinetikus és tömegtagok

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \sum_{j=t,b} \bar{F}_j \left(\frac{i}{2} \vec{\partial} - m_j^j \right) F_j - \frac{1}{2} \cdot (\partial^\lambda \bar{W}^\mu - \partial^\mu \bar{W}^\lambda) \cdot (\partial_\lambda W_\mu - \partial_\mu W_\lambda) + m_w^2 \cdot \bar{W}^\lambda W_\lambda - \\ & - \frac{1}{4} (\partial^\lambda Z^\mu - \partial^\mu Z^\lambda) \cdot (\partial_\lambda Z_\mu - \partial_\mu Z_\lambda) + \frac{1}{2} m_z^2 \cdot Z^\lambda Z_\lambda - \frac{1}{4} (\partial^\lambda A^\mu - \partial^\mu A^\lambda) \cdot (\partial_\lambda A_\mu - \partial_\mu A_\lambda) + \\ & + \frac{1}{2} \partial_\lambda H \cdot \partial^\lambda H + \partial_\lambda \bar{G} \cdot \partial^\lambda G + \frac{1}{2} \partial_\lambda h \cdot \partial^\lambda h - \frac{m_H^2}{2} \cdot H^2 + \end{aligned} \quad (2.46)$$

a vektorbozonok és a fermionok kölcsönhatásai:

$$\begin{aligned} & + e \cdot \sum_{j=t,b} q_j \cdot \bar{F}_j A F_j + \frac{g}{\sqrt{2}} \cdot \left(\bar{F}_t W \frac{1+\gamma^5}{2} F_b + \bar{F}_b \tilde{W} \frac{1-\gamma^5}{2} F_t \right) - \bar{F}_b \cdot Z \times \\ & \times \left(\frac{g \cos \theta_w + (1+4q_b) g' \sin \theta_w}{4} + \gamma^5 \cdot \frac{g \cos \theta_w + g' \sin \theta_w}{4} \right) F_b + \bar{F}_t \cdot Z \times \\ & \times \left(\frac{g \cos \theta_w - g' \sin \theta_w}{4} + \gamma^5 \cdot \frac{g \cos \theta_w - (1-4q_t) g' \sin \theta_w}{4} \right) F_t - \end{aligned} \quad (2.47)$$

a Higgs-fermion csatolások:

$$- \sum_{j=t,b} \frac{m_j^j}{v} \cdot \bar{F}_j F_j \cdot H + \quad (2.48)$$

a Higgs-tér öncsatolásai:

$$+ \frac{g m_H^2}{4 m_w} \cdot H^3 - \frac{g^2 m_H^2}{32 \cdot m_w^2} \cdot H^4 + \quad (2.49)$$

a Higgs-vektorbozon csatolások:

$$+ gm_w \cdot H \bar{W}^\lambda W_\lambda + \frac{gm_z}{2 \cos \theta_w} \cdot H Z^\lambda Z_\lambda + \frac{g^2}{4} H^2 \cdot \bar{W}^\lambda W_\lambda + \frac{g^2}{8 \cos^2 \theta_w} \cdot Z^\lambda Z_\lambda \cdot H^2 - \quad (2.50)$$

és végül a vektorterek egymáshoz való csatolásai:

$$\begin{aligned} & -ie \cdot [\partial_\lambda A_\mu (W^\lambda \bar{W}^\mu - W^\mu \bar{W}^\lambda) + \partial_\lambda \bar{W}_\mu (A^\lambda W^\mu - W^\lambda A^\mu) + \partial_\lambda W_\mu \cdot (\bar{W}^\lambda A^\mu - A^\lambda \bar{W}^\mu)] + \\ & + ig \cos \theta_w \cdot [\partial_\lambda Z_\mu \cdot (W^\lambda \bar{W}^\mu - W^\mu \bar{W}^\lambda) + \partial_\lambda \bar{W}_\mu \cdot (Z^\lambda W^\mu - Z^\mu W^\lambda) + \partial_\lambda W_\mu \cdot (\bar{W}^\lambda Z^\mu - \bar{W}^\mu Z^\lambda)] + \\ & + \frac{g^2}{2} \cdot [(\bar{W}^\lambda \bar{W}_\lambda)(W^\mu W_\mu) - (\bar{W}^\lambda W_\lambda) \cdot (\bar{W}^\mu W_\mu)] + g^2 \cos \theta_w \cdot [(\bar{W}^\lambda Z_\lambda)(W^\mu Z_\mu) - \\ & - (\bar{W}^\lambda W_\lambda) \cdot (Z^\mu Z_\mu)] - e^2 \cdot [(\bar{W}^\lambda A_\lambda) \cdot (W^\mu A_\mu) - (\bar{W}^\lambda W_\lambda)(A^\mu A_\mu)] - eg \cos \theta_w \times \\ & \times [(\bar{W}^\lambda Z_\lambda) \cdot (W^\mu A_\mu) + (\bar{W}^\lambda A_\lambda)(W^\mu Z_\mu) - 2(\bar{W}^\lambda W_\lambda) \cdot (A^\mu Z_\mu)] \end{aligned} \quad (2.51)$$

a további tagokat, amelyek a G és h szellem-részecskék csatolásait tartalmazzák, a Függelékben (8.2) közöljük.

A Z^λ vektorbozon a semleges gyenge áramhoz csatolódik, mely felírható

$$J_Z^\lambda = J_3^\lambda - 2 \sin^2 \theta_w \cdot J_{EM}^\lambda \quad (2.52)$$

alakban, ahol J_3^λ az izospin áram 3. komponense.

A GIM mechanizmus általánosításaként a ritkaságváltó és charm váltó folyamatok elnyomását a Cabibbe-elforgatáshoz hasonló

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} d' \\ s' \\ b' \end{pmatrix} = \\ & = \begin{pmatrix} \cos \theta_1 & -\sin \theta_1 \cos \theta_3 & -\sin \theta_1 \sin \theta_3 \\ \sin \theta_1 \cos \theta_2 & \cos \theta_1 \cos \theta_2 \cos \theta_3 - \sin \theta_2 \sin \theta_3 e^{i\delta} & \cos \theta_1 \cos \theta_2 \sin \theta_3 + \sin \theta_2 \cos \theta_3 e^{i\delta} \\ \sin \theta_1 \sin \theta_2 & \cos \theta_1 \sin \theta_2 \cos \theta_3 + \cos \theta_3 \sin \theta_3 e^{i\delta} & \cos \theta_1 \sin \theta_2 \cos \theta_3 - \cos \theta_2 \cos \theta_3 e^{i\delta} \end{pmatrix} \times \\ & \times \begin{pmatrix} d \\ s \\ b \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.53)$$

Kobayashi—Maskawa-mátrix írja le, ahol δ a CP sértést jellemző paraméter, és az erős kölcsönhatásban részt vevő kvarkok, $(d' s' b')$ a (dsb) áramkvarkok lineáris kombinációi.

Sakurai [19] szerint

$$U \approx \begin{pmatrix} ,974 & ,219 & ,059 \\ -,213 & ,845 & ,488 \\ -,057 & ,489 & ,870 \end{pmatrix}. \quad (2.54)$$

A (2.46—2.54) képletekben szereplő állandók közül

$$m_w = \frac{gv}{2}, \quad m_z = \frac{gv}{2 \cos \theta_w}, \quad e = \sqrt{4\pi\alpha}, \quad \alpha^{-1} = 137,3.$$

Mint látni fogjuk, m_z ilyen értéke a Higgs dublett reprezentáció következménye.

A spontán sérülő 3 paraméteres részecsceportnak megfelelően a mérték megfelelő megválasztásával a G és h terek az elméletből kitranszformálhatók (unitér mérték). Ebben az esetben a W , ill. Z propagátorok alakja,

$$\left(g_{\lambda\mu} - \frac{p_\lambda p_\mu}{m_v^2} \right) \cdot \frac{1}{p^2 - m_v^2}, \quad (2.55)$$

nagy impulzusokra szingularitásokat hoz be. Ezek a renormálható mértékben nem jelennek meg, tehát egymást ki kell ejtsék, a renormálható mértékben való számolás-kor azonban az összes szellem propagátort figyelembe kell venni. A mérték transzformáció elektromágneses része még nem fixált, itt a fotonra vonatkozó bármely mérték használható, mint QED -ben.

A Weinberg—Salam-féle modellnek kis energiákra a jól bevált Fermi-féle elmélettel azonos eredményt kell adnia. Ennek feltétele

$$G_F = \frac{g^2}{4\sqrt{2}m_w^2}. \quad (2.56)$$

A modell paramétereinek rögzítése csak a semleges gyenge (Z) áram felfedezése után volt lehetséges. Ezzel az elfogadott értékek:

$$m_w \approx 75 \text{ GeV}, \quad m_z \approx 90 \text{ GeV}, \quad \sin^2 \theta_w \approx 0,23. \quad (2.57)$$

Az elmélet ezen túl még egy szabad paramétert tartalmaz: a Higgs részecske m_H tömegét. A Lagrange-sűrűségből látható, hogy ennek kiszámítására nincs lehetőség mindaddig, amíg a részecske valamelyik csatolását nem figyelték meg.

Az elméletben szereplő fermionok jellemző értékeit az elmélet nem jósolja meg: ezek éppen a szabad paraméterek lerögzítéséhez szükségesek. Az alábbiakban közöljük a fermionok tulajdonságait, beleértve a még fel nem fedezett t és ν_t -t is. A kvarkok esetében tömegként az áramkvark tömegeket adjuk meg.

2.6. Gráfszabályok

A fenti Lagrange-sűrűségeket most impulzus-reprezentációbeli gráfszabályokká alakítjuk. Ekkor különös gondot csak a derivált csatolások jelentenek. Az S -mátrix ugyanis

$$Te^{-i \int \mathcal{H}(x) d^4x}; \quad T A(x) B(y) = \theta(x^0 - y^0) A(x) B(y) \pm \theta(y^0 - x^0) B(y) A(x) \quad (2.58)$$

a derivált csatolások esetében nehezen értékelhető ki, ugyanis mind \mathcal{H} , mind a T operátor nem kovariáns részeket tartalmaz. Mivel azonban tudjuk, hogy a T -szorzat csak a 0-komponensektől függ, ezért [2] a

$$\mathcal{L} \sim \mathcal{J}^\lambda \partial_\lambda \Phi \rightarrow \mathcal{H} \sim -\mathcal{J}^\lambda \partial_\lambda \Phi + \mathcal{J}^0 \partial_0 \Phi \quad (2.59)$$

1. TÁBLÁZAT

Fermionok

Fermion	q_t	q_b	m_j^t	m_j^b	η_{color}	Γ_{tot}
$\begin{pmatrix} \nu_e \\ e \\ u \\ d \end{pmatrix}$	$\begin{matrix} 0 \\ -1 \\ 2/3 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -1 \\ -1/3 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 30 \text{ eV} \\ 4,2 \text{ MeV} \end{matrix}$	$\begin{matrix} 0,511 \text{ MeV} \\ 7,5 \text{ MeV} \end{matrix}$	$\begin{matrix} 1 \\ 1 \\ 3 \\ 3 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 0 \\ 0 \end{matrix}$
$\begin{pmatrix} \nu_\mu \\ u \\ c \\ s \end{pmatrix}$	$\begin{matrix} 0 \\ 2/3 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -1 \\ -1/3 \end{matrix}$	$\begin{matrix} ? \\ 1,2 \text{ GeV} \end{matrix}$	$\begin{matrix} 105,7 \text{ MeV} \\ 150 \text{ MeV} \end{matrix}$	$\begin{matrix} 1 \\ 1 \\ 3 \\ 3 \end{matrix}$	$\begin{matrix} (?) 0 \\ 2,995 \cdot 10^{-10} \text{ eV} \end{matrix}$
$\begin{pmatrix} \nu_\tau \\ \tau \\ t \\ b \end{pmatrix}$	$\begin{matrix} 0 \\ 2/3 \end{matrix}$	$\begin{matrix} -1 \\ -1/3 \end{matrix}$	$\begin{matrix} ? \\ 20-30 \text{ GeV} \\ (?) \end{matrix}$	$\begin{matrix} 1,807 \text{ GeV} \\ 4,4 \text{ GeV} \end{matrix}$	$\begin{matrix} 1 \\ 1 \\ 3 \\ 3 \end{matrix}$	$\begin{matrix} (?) 0 \\ 1,43 \cdot 10^{-3} \text{ eV} \end{matrix}$

Vektorbozonok [9]

Bozon	m_v	q_v	Γ_{tot}
W	76 GeV	± 1	2,47 GeV
Z	87 GeV	0	2,49 GeV
foton	0	0	0

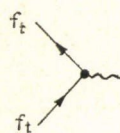
járulékból a $J^0 \partial_0 \Phi$ részt elhagyva kovariáns kifejezést kapunk. Ez ekvivalens az S -mátrix

$$S \sim T^* e^{i \int \mathcal{L}(x) d^4 x}$$

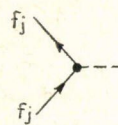
felírásával, amely az előző kifejezéstől csak az azonos idejű helyekben különbözik, ahol az operátorok szorzatai nincsenek definiálva.

Az alábbiakban közöljük a Weinberg—Salam-modell vertexeit. Az impulzusokat mindenütt befelé irányítjuk, a nyíl iránya a leptonszám, bozonok esetében a töltés haladási irányát jelenti.

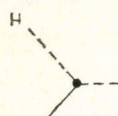
$$\begin{aligned}
 & \text{Diagram 1: } f_j \text{ and } f_j \text{ meet at a vertex with } \gamma_\mu \text{ boson. Factor: } -ieq\gamma_\mu \\
 & \text{Diagram 2: } f_b \text{ and } f_t \text{ meet at a vertex with } W_\mu \text{ boson. Factor: } -\frac{ig}{\sqrt{2}} \cdot \gamma_\mu \frac{1+\gamma^5}{2} \\
 & \text{Diagram 3: } f_b \text{ and } f_t \text{ meet at a vertex with } Z_\mu \text{ boson. Factor: } i\gamma_\mu \cdot \left(\frac{g \cos \theta_w + (1+4q_b) \cdot g' \sin \theta_w}{4} + \gamma^5 \cdot \frac{g \cos \theta_w + g' \sin \theta_w}{4} \right)
 \end{aligned}$$



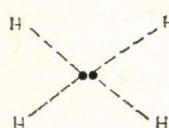
$$-i\gamma_\mu \left(\frac{g \cos \theta_w - g' \sin \theta_w}{4} + \gamma^5 \cdot \frac{g \cos \theta_w - (1 - 4q_t) \cdot g' \sin \theta_w}{4} \right)$$



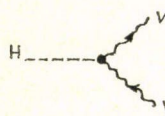
$$i \cdot \frac{2m_f^j}{gm_w}$$



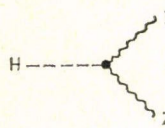
$$-i \cdot \frac{gm_H^2}{4m_w}$$



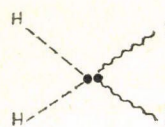
$$i \frac{g^2 m_H^2}{32m_w^2} \quad (g\text{-ben másodrendű})$$



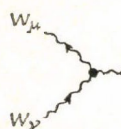
$$-igm_w \cdot g^{\mu\nu}$$




$$-i \frac{gm_z}{2 \cos \theta_w} \cdot g^{\mu\nu}$$



$$-i \frac{g^2}{8 \cos^2 \theta_w} \cdot g^{\mu\nu}$$



$$\mathcal{G}_\lambda - ie[(p - p')_\lambda g_{\mu\nu} + p'_\nu g_{\lambda\mu} - p_\mu g_{\lambda\nu}]$$



$$ig \cos \theta_w \cdot [(p - p')_\lambda g_{\mu\nu} + p'_\nu \cdot g_{\lambda\mu} - p_\mu \cdot g_{\lambda\nu}]$$

$$-i \frac{g^2}{2} (g^{\mu\nu} g^{\lambda\lambda} - g^{z\mu} g^{\lambda\nu})$$

$$-ig^2 \cos \theta_w \cdot (g^{z\mu} g^{\lambda\nu} - g^{z\lambda} g^{\mu\nu})$$

$$ie^2 \cdot (g^{z\mu} g^{\lambda\nu} - g^{z\lambda} g^{\mu\nu})$$

$$-ieg \cos \theta_w \cdot (g^{z\nu} g^{\lambda\mu} + g^{\lambda\nu} g^{z\mu} - 2g^{\lambda z} g^{\mu\nu})$$

Az elméletben az itt tárgyaltakon kívül még (a mértékterek kvantálásakor) skalár fermion propagátorok lépnek fel.

3. A WEINBERG—SALAM-MODELL KÍSÉRLETI HELYZETE

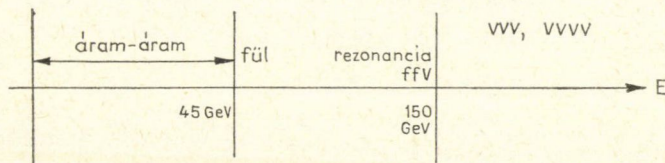
A Weinberg—Salam-modell a gyenge és elektromágneses kölcsönhatások leírására tart igényt. Alapvető, igazolást igénylő pontjai:

1. A W és Z bozonok létezése és csatolásaik egyezése a modell által jósolttal.
2. A Higgs részecske(k) létezése és tömegarányos csatolódása.

Mivel az elmélet minden fizikai következménye következik a tömegekből és csatolásokból, így a spontán sértett mértékinvariancia tényét ezek egyezése már igazolja.

A gyenge kölcsönhatásokra kis energián a Fermi-féle áramáram elmélet jó eredményeket jósol, így azt — és a QED -t — alacsonyenergiás ($\sqrt{s} < 10$ GeV) határesetben vissza kell kapnunk. Az elmélet megszabja a töltött és semleges áramok szerkezetét, így ezek egyezése már Z és W felfedezése előtt jó indikáció a modell helyességére.

A vizsgálható energiatartományt a 2. ábra szerint lehet felosztani.



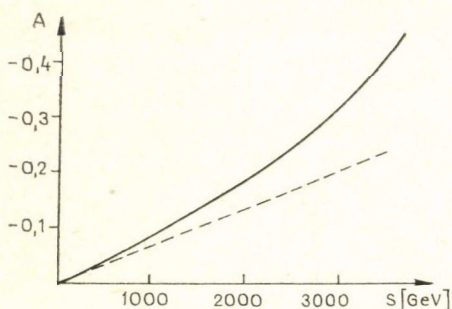
2. ábra

A 45 GeV alatti tartományban csak az áramok szerkezete vizsgálható. A W csatolások egyformasága a töltött áram univerzalitására vezet, ez a WS modellre nem szignifikáns. A gyenge semleges áram szerkezetét a viszonylag bizonytalan kvark adatokon túl (pl. Cabibbo-szögek) fermiongenerációnként 8 csatolási állandó szabja meg. Ezeknek egymáshoz való viszonya már rögzíti a mértékcsoportot; a Weinberg—Salam-modell esetében ezek az egyetlen θ_w paramétertől függenek.

A 45 GeV és 150 GeV közti tartomány alkalmas a W és Z bozonok felfedezésére. A tömegüknek megfelelő energián ezek kb. 2 GeV rezonanciaként jelentkeznek, de már kisebb energián látható „fűlök”, a rezonanciagörbe felszálló ága. Erre lehetőséget ad a legközelebbi jövőben az $e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-$ folyamatban a Z/γ interferenciátág vizsgálata [20]. A teljes hatáskeresztmetszetszeli előre-hátra aszimmetria

$$A = \frac{\sigma(\theta < 90^\circ) - \sigma(\theta > 90^\circ)}{\sigma(\theta < 90^\circ) + \sigma(\theta > 90^\circ)} \quad (3.1)$$

energiafüggését a 3. ábra mutatja, $m_Z = 93$ GeV és ∞ értékekre. Az aszimmetria mértéke 35 GeV-on $A = -9,6\%$, amiből 1,5 %-ot okoz m_Z végessége. A jelenlegi 2 % körüli mérési hibák miatt [11] még nem lehet mérni m_Z -t, de a 45 GeV-os maximális PETRA energián ez már lehetségessé válik. A rezonanciaenergia felett az ffW , ffZ csatolások ellenőrizhetők.



3. ábra. Előre-hátra aszimmetria $e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-$ folyamatban, a \sqrt{s} tömegközépponti energia függvényében

A 150 GeV feletti tartományban megvizsgálhatók a 3 és 4 vektorrészcseke csatolások. Ezek a csatolások jellemzőek a mértékelméletekre, és egyezésük esetén állíthatjuk, hogy nagy energiás $m_W, m_Z \rightarrow 0$ skála határértékben nem sértett mértékinvariancia érvényes.

Összefoglaljuk az eddigi kísérleti eredményeket, melyek kizárólag a 45 GeV alatti tartományra (áram-áram modell érvényes) vonatkoznak.

Az itt mérhető semleges gyenge áramok szerkezetét leginkább a neutrínó-lepton rugalmas szórásban, elektron-pozitron annihilációban, lepton-hadron szórásban és atomfizikai folyamatokban vizsgálták.

1. Tiszta leptonos folyamatok

$$\left. \begin{array}{l} \text{a) } \nu_e e^- \rightarrow \nu_e e^- \\ \text{b) } \bar{\nu}_e e^- \rightarrow \bar{\nu}_e e^- \\ \text{c) } \nu_\mu e^- \rightarrow \nu_\mu e^- \\ \text{d) } \bar{\nu}_\mu e^- \rightarrow \bar{\nu}_\mu e^- \end{array} \right\} \text{ rugalmas szórások.}$$

Ezeknek a folyamatoknak a hatáskeresztmetszete az áram-áram modell a

$$\frac{d\sigma}{dy} = \frac{2G^2 \cdot m_e \cdot E}{\pi} \cdot \left[\left(\frac{C_V + C_A}{2} \right)^2 + \left(\frac{C_V - C_A}{2} \right)^2 \cdot (1-y)^2 \right] \quad (3.2)$$

összefüggést adja, ahol

$$y = \frac{1}{2} \cdot (1 - \cos \theta_{CM}), \quad 0 \leq y \leq 1 \quad (3.3)$$

a tömegközépponti rendszerbeli szórási szöget jellemzi, a c_V , c_A állandók a vektor és axiálvektor csatolásokat jellemzik:

2. TÁBLÁZAT

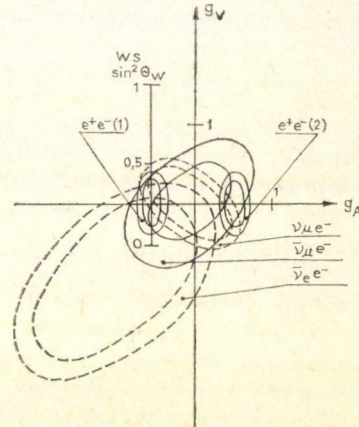
Folyamat	c_V	c_A
a) $\nu_e e^- \rightarrow \nu_e e^-$	$1 + g_V$	$1 + g_A$
b) $\bar{\nu}_e e^- \rightarrow \bar{\nu}_e e^-$	$1 + g_V$	$-1 - g_A$
c) $\nu_\mu e^- \rightarrow \nu_\mu e^-$	g_V	g_A
d) $\bar{\nu}_\mu e^- \rightarrow \bar{\nu}_\mu e^-$	g_V	$-g_A$

$$\left[\text{itt } \mathcal{L} = \sqrt{\sqrt{2} G_F \cdot m_z \cdot \bar{\psi} Z (g_V - g_A \gamma^5) \psi} \right].$$

Kísérletileg az a) folyamatot megfelelő neutrínóforrás hiányában nem lehetett megmérni (ν_μ -ket a pionbomlásból kb. 100-szor nagyobb fluxussal kaphatunk, mint a legjobb ν_e forrás), a többi folyamatra a mérések [11–16] eredményeit a 4. ábra mutatja. A mérések a megfelelő két ellipszis közötti satírozott területet engedik meg. Az adatok egybevetéséből látható, hogy a két lehetséges terület egyikét csak az annihilációs kísérletek választják ki, ez pedig megfelel a Weinberg–Salam-modellnek $\sin^2 \theta_W = 0,23$ választással.

e) $e^+ e^- \rightarrow l^+ l^-$; $l = e, \mu, \tau$ annihiláció.

Ezek a folyamatok foton és Z cserével is lehetségesek; jelenleg a gyenge részt csak a Z/γ interferencián keresztül tudjuk megfigyelni. Az $e^+ e^- \rightarrow \mu^+ \mu^-$ folyamatban tisztán megfigyelhető a (3.1) aszimmetria (10%-ig), ami a semleges gyenge leptonáram létét bizonyítja. A $g_A - g_V$ diagrammon a mérési eredmények a [10, 17, 18] 4. ábrán jelzett tartományt választják ki.



4. ábra. A rugalmas neutrínó-elektron és az annihilációs kísérletek eredménye. Együttesen éppen a WS modell által jósolt $\sin^2 \theta_W = 0,23$ -at jelölik ki

2. Lepton-hadron szórás

Ezekben a folyamatokban, melyek W , Z és esetleg foton cserével mennek végbe, a hatáskeresztmetszetek függenek a kvarkok állapotától. Szabad kvarkokat feltételezve összefüggést keresünk a különböző hatáskeresztmetszetek között; ekkor a következő összefüggéseket találjuk [10]:

$$u_L^2 + u_R^2 = \frac{R_V - r^2 \cdot R_{\bar{V}}}{1 - r^2} \quad (3.4)$$

és

$$u_R^2 + d_R^2 = \frac{r(R_{\bar{v}} - R_v)}{1 - r^2}, \quad (3.5)$$

ahol u_L, u_R, d_L, d_R a megfelelő kvarkok jobbkezes, ill. balkezes csatolásai (pl. $g_A = g_L - g_R$),

$$r = \frac{\sigma_{CC}(\bar{v}N)}{\sigma_{CC}(vN)}, \quad R_v = \frac{\sigma_{NC}(vN)}{\sigma_{CC}(vN)}, \quad R_{\bar{v}} = \frac{\sigma_{NC}(\bar{v}N)}{\sigma_{CC}(\bar{v}N)}, \quad (3.6)$$

ahol NC semleges Z cserét, CC W cserét jelöl, és σ a megfelelő neutrínó inkluzív szórási hatáskeresztmetszete izoskalár targeten, amit nehéz vassal lehet megvalósítani. Érvényes a hadronmodelltől független

$$\frac{R_v - R_{\bar{v}}}{1 - r} = \frac{1 - 2 \sin^2 \theta_w}{2} \quad (3.7)$$

Paschos—Wolfenstein reláció [20].

Ha ugyanezeket a méréseket nem izoskalár maggal, hanem nukleonokkal végezzük el, akkor a megfelelő arányok [21]

$$R_p = 2u_L^2 + d_L^2, \quad (3.8)$$

$$R_n = 2d_L^2 + u_L^2$$

segítségével u_L és d_L értékét kaphatjuk meg. A kisugárzott pionok töltés aszimmetriájából a jobbkezes csatolási állandók is meghatározhatók [19]. Ezeket a kísérleteket egyesítve [22] a csatolási állandók és a WS jóslatok ($\sin^2 \theta_w = 23$)

$$\begin{aligned} u_L &= ,340 \pm ,033 & (,347) \\ d_L &= -,424 \pm ,026 & (-,423) \\ u_R &= -,179 \pm ,019 & (-,153) \\ d_R &= -,017 \pm ,058 & (-,077). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Az összes eredmény tehát hibakorláton belül megfelel a WS modellnek.

3. Optikai forgatás

A fénypolarizáció mérése a paritásértés nagy pontosságú kimutatását teszi lehetővé, éspedig éppen a semleges gyenge áramot mutatja ki. Ha a foton-atom kölcsönhatás Hamilton-függvénye paritásértő tagot tartalmaz, akkor ez megjelenhet az előreszórási amplitúdóban: $f_R \neq f_L$. Ekkor az optikai tétel következtében $n_R - n_L = \frac{2\pi Q}{k^2} \cdot (f_R - f_L)$ sem zérus. Síkban polarizált fénynyaláb esetén ez a polarizációs síknak

$$\Phi(x) = \frac{\omega}{2c} \cdot \text{Re}(n_L - n_R) \cdot x = \frac{\pi c Q}{\omega} \cdot x \cdot \text{Re}(f_R - f_L)$$

szöggel való elfordulását okozza. A paritásértés, mivel a gyenge kölcsönhatásból adódik, egy arányos tagot jelent az elektronok potenciáljában, ami kis perturbációnak tekinthető. A nem perturbált $|\alpha\rangle$ állapotok P sajátállapotok, melyekbe a perturbáció bekever valamely $|\bar{\alpha}\rangle$ más (itt most csak egy ilyen irunk ki) ellentétes paritású állapotot. Így a fizikai $|\alpha'\rangle$ állapot

$$|\alpha'\rangle = |\alpha\rangle + \eta_{\bar{\alpha}} \cdot |\bar{\alpha}\rangle \quad (3.11)$$

Ha most a paritásértő átmenetet akarjuk kimutatni, akkor olyan $|\alpha'\rangle$ és $|\beta'\rangle$ állapotokat kell kiválasztanunk, melyre a $|\beta\rangle \rightarrow |\alpha\rangle$ $E1$ átmenet tiltott, és $M1$ megengedett. Ekkor a $|\beta\rangle$ állapotban részt vevő kis $|\bar{\beta}\rangle$ tagból való átmenet ad paritásértő járulékot. A jelenség csak nehéz magok esetében mutatható ki (az atom rendszámával köbösen nő); ekkor viszont az elektronhéjak nehezen számíthatók. Végül is az elforgatás szögére a

$$\frac{\Phi(x)}{x \cdot a} = \frac{\omega_{\alpha} - \omega_{\beta}}{\frac{1}{2} \Gamma_{\beta}} \cdot \frac{\text{Im} \langle \beta' | E1 | \alpha' \rangle}{\langle \beta | M1 | \alpha \rangle}, \quad a = \text{abszorpciókoefficiens} \quad (3.12)$$

összefüggést kaphatjuk [23], melyet több kísérletben mértek. A mérési eredmények $_{83}\text{Bi}^{209}$ esetében a különböző vonalakra

$$\frac{\Phi(x)}{x \cdot a} \sim 10^{-7}$$

nagyságrendű eredményeket szolgáltatottak. Az elméleti jóslatok nagy pontatlansága (20–50%) által meghatározott határokon a mért értékek belül vannak [24–30].

4. W és Z felfedezése

E dolgozat megírása után, 1983 elején a CERN SPS proton-antiproton kísérletben $\sqrt{s} = 540$ GeV energián sikerült felfedezni a W és Z bozonokat [49, 50]. A mért eredmények mindenben megfelelnek az elméleti várakozásnak, és sikerült pontosabb korlátot kapni az ω szög értékére is. Az észlelt folyamatok

$$\begin{array}{ll} p\bar{p} \rightarrow WX \downarrow_{ev} ; \quad \sigma \sim 6 \cdot 10^{-34} \text{ cm}^2 & \left. \begin{array}{l} 6 \text{ esemény,} \\ \text{később még 20 db} \end{array} \right\} \\ p\bar{p} \rightarrow ZX \downarrow_{\mu^+ \mu^-} ; \quad \sigma \sim 10^{-34} \text{ cm}^2 & \left. \begin{array}{l} 4 \text{ db } e^+ e^- \\ 1 \text{ db } \mu^+ \mu^- \end{array} \right\} \text{ esemény} \end{array}$$

A kísérletek által adott értékek, zárójelben az elméleti jóslattal, melyet az alacsony energiás kísérletekből nyerünk:

$$m_w = 81 \pm 2 \text{ GeV}$$

$$m_z = 95,2 \pm 2,5 \text{ GeV } (94 \pm 2,5)$$

$$\Gamma_z = 3,1 \text{ GeV } (3,0)$$

Ezzel $\sin^2 \theta_w = 0,226 \pm 0,011$ ($0,236 \pm 0,03$) és

$$\varrho = \frac{m_w^2}{m_z^2 \cdot \cos^2 \theta_w} = 0,94 \pm 0,06 \quad (1.)$$

ami a magasabb Higgs multiplettek hiányára utal.

4. A HIGGS SZEKTOR

4.1. Higgs multiplettek

A Weinberg—Salam-modell csoportszerkezetét, a közbülső bozonokat az eddigi eredmények már viszonylag jól rögzítették. Nem mondható el ugyanez azonban a Higgs szektorról, ahol csak részben kapunk információt a jelenlegi kísérleti adatokból.

A Higgs-terek $SU(2) \times U(1)$ invariancia miatt feltétlenül $SU(2)$ multiplettekben szerepelnek. A kísérleti eredmények alapján e multiplettek között lehet dönteni.

Tegyük fel egyelőre, hogy a Higgs-terek valamely (nem feltétlenül irreducibilis) reprezentáció szerint transzformálódnak. A megfelelő vektorindexeket a Φ , v , t vektorokban és mátrixokban nem fogjuk jelölni. A Higgs-terek transzformációja

$$\Phi \rightarrow e^{i(\omega t + \omega t)} \Phi. \quad (4.1)$$

A vektorbozonoknak a fizikai W , Z , A terekkel való kapcsolatát tetszőleges faktor erejéig már rögzíti az $SU(2) \times U(1)$ szerkezet és a töltéstranszformáció megmaradása, így a (2.44—45) képletek érvényben maradnak. Ekkor a Higgs szektornak a 2. fejezetbelitől való eltérése a Higgs-részecske csatolásain túl csak a W , Z , A bozonok tömegtagjában jelenik meg:

$$\frac{1}{4} \tilde{v} \cdot (gAt + g'Bt)^2 \cdot v. \quad (4.2)$$

Jelölje most v a Higgs-terek vákuumértékét: $\langle 0|\Phi|0\rangle = v$. A $t_q = t - t_3$ töltéstranszformációra szükséges $t_q v = 0$. Ennek segítségével a (4.2) kifejezésből eltüntethetjük t -t, és így a tömegeket kizárólag az $SU(2)$ generátorok fogják meghatározni. Beírva Z , W és A tereket

$$\frac{g^2}{4} \tilde{v} \cdot \left(\bar{W} \cdot t_+ + W \cdot t_+ + \frac{g'}{g \sin \theta_w} \cdot Z \right) \cdot v. \quad (4.3)$$

Elvégezve a négyzetreemelést, megköveteljük a tömegmátrix diagonalizálódását. Így a következő feltételeket kapjuk:

$$\begin{aligned} \tilde{v} t^+ t^+ v = 0, \quad \frac{1}{2} \tilde{v} \{t^+; t^-\}_+ v = 0, \quad \frac{\tilde{v} t_3 t_3 v}{\frac{1}{2} \tilde{v} \{t^+; t^-\}_+ v} &= \left(\frac{m_z \cos \theta_w}{m_w} \right)^2. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Az m_W -t tartalmazó tagban a kifejezés értékét a kisenergiás határérték a Fermi-féle G_F állandóhoz rögzíti, ezzel fixálható a szimmetriasértés nagysága. Az $(m_Z \cdot \cos \theta_W / m_W)$ értéke ad tehát információt arról, hogy milyen multipllettbe tartoznak a Higgs-terek. A semleges gyenge áramok mérése kis energián — pl. e^+e^- és $\bar{\nu}\nu$ folyamatokban már ad lehetőséget ennek meghatározására. A tapasztalt ~ 1 érték [24] ezt sugallja, hogy dublett(ek) vannak jelen, ez semmit sem mond a dublettek számáról, ezért áttekintjük azt az esetet is, amikor két szimmetriasértő Higgs dublett van.

4.2. A két dublettes modell [31]

Az a feltételezés, hogy egyetlen Higgs dublett van, nem több, mint találgatás. Több dublett feltételezése esetén — ha a Higgs-részecske esetleg összetett volna — akkor gerjesztett állapotait láthatjuk a többi részecskeként. Legalább 3 dublett esetén CP sértést is be lehet vezetni.

A két dublettes modellben 8 Higgs-tér van, ebből 3 Goldstone-bozon eltűnik, megmarad 1 töltött (H^\pm) és három semleges ($H^\circ, h^\circ, \Phi^\circ$) részecske. A szimmetriasértő potenciál CP tartó alakja

$$V(\Phi) = \lambda_1(\bar{\Phi}_1\Phi_1 - v_1^2)^2 + \lambda_2(\bar{\Phi}_2\Phi_2 - v_2^2)^2 + \lambda_3[(\bar{\Phi}_1\Phi_1 - v_1^2) + (\bar{\Phi}_2\Phi_2 - v_2^2)] + \\ + \lambda_4[(\bar{\Phi}_1\Phi_1)(\bar{\Phi}_2\Phi_2) - (\bar{\Phi}_1\Phi_2)(\bar{\Phi}_2\Phi_1)] - \frac{1}{4}\lambda_5 \cdot (\Phi_2\bar{\Phi}_1 - \bar{\Phi}_2\Phi_1)^2. \quad (4.5)$$

A szimmetriasértés mértéke

$$\langle 0 | \Phi | 0 \rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{v} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v} = \sqrt{v_1^2 + v_2^2} \cdot (\cos \beta | \sin \beta). \quad (4.6)$$

Az eltolt terek bevezetése a következőképpen történik:

$$\Phi = \begin{pmatrix} \mathbf{F}^+ \\ \mathbf{F} + \mathbf{v} \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

és a (4.5) kvadratikus alakjainak diagonalizálása (ez közvetlen utánaszámolással ellenőrizhető) a következőképpen lehetséges:

$$\mathbf{F}^+ = (G^+ \cos \beta - H^+ \sin \beta | G^+ \sin \beta + H^+ \cos \beta), \\ \mathbf{F} = \left(\frac{\Phi^\circ \cos \alpha + h^\circ \sin \alpha}{\sqrt{2}} + i \frac{G^\circ \cos \beta - H^\circ \sin \beta}{\sqrt{2}} \middle| \frac{-\Phi^\circ \sin \alpha + h^\circ \cos \alpha}{\sqrt{2}} + \right. \\ \left. + i \frac{G^\circ \sin \beta + H^\circ \cos \beta}{\sqrt{2}} \right). \quad (4.8)$$

Az egyes fizikai Higgsek tömegei

$$\begin{aligned}
 m_{H^\pm} &= \frac{2m_w^2}{g} \cdot \lambda_4 & a &= (\lambda_1 + \lambda_3) \cdot \cos^2 \beta \\
 m_{H^0} &= \frac{2m_w^2}{g} \cdot \lambda_5 & c &= (\lambda_2 + \lambda_3) \cdot \sin^2 \beta \\
 m_{\Phi^0} &= \frac{4m_w^2}{g} \cdot (a + c - d) & d &= \sqrt{(c - a)^2 + (2b)^2} \\
 m_{h^0} &= \frac{4m_w^2}{g} \cdot (a + c + d) & \sin \alpha &= \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{c - a}{2d}} \\
 m_{\Phi^0} &> m_{h^0} & 0 &\leq \alpha, \beta \leq \frac{\pi}{2}.
 \end{aligned} \tag{4.9}$$

Az elméletben szereplő paraméterek a minimális modell paraméterein kívül független paraméterként éppen a Higgs-tömegeket (4 db), valamint az α és β paramétereket tartalmazzák. A vektorbozonok tömegeire kapjuk:

$$m_z = \frac{m_w}{\cos \theta_w}; \quad m_w = \frac{g}{\sqrt{2}} \cdot \sqrt{v_1^2 + v_2^2}, \tag{4.10}$$

ezek rögzítik a szimmetriasértés nagyságát.

A Higgs-fermion csatolások alakja

$$\sum_{k=1,2} \frac{m_f^j(k)}{v(k)} \cdot \left[\tilde{F}_L \cdot \Phi_j(k) \frac{1-\gamma^5}{2} F_R^j + \text{h.c.} \right]. \tag{4.11}$$

Bevezetve a γ_f paramétereket, amely fermionként különbözhet,

$$m_f^j(k) = m_f \cdot (\sin^2 \gamma_f | \cos^2 \gamma_f) \quad 0 \leq \gamma_f \leq \frac{\pi}{2}, \tag{4.12}$$

végül a csatolás

$$\frac{gm_f^j}{\sqrt{2}m_w} \cdot \left(\frac{\cos \beta}{\cos \gamma_f^j} \left| \frac{\sin \beta}{\sin \gamma_f^j} \right. \right) \cdot \left(\tilde{F}_L \Phi_j(k) \frac{1-\gamma^5}{2} F_R^j + \text{h.c.} \right). \tag{4.13}$$

Kiszámítjuk a csatolásokat. A Higgs-tereket nem tartalmazó csatolások megegyeznek a minimális modellel, a többi pedig:

1. — a Higgs-fermion csatolások:

$$\begin{aligned}
 & - \sum_{j=t,b} \frac{gm_f^j}{\sqrt{2}m_w} \cdot (\sin^2 \gamma_f^j \cdot \text{ctg } \beta - \cos^2 \gamma_f^j \cdot \text{tg } \beta) \cdot \left(\tilde{F}_j \frac{1+\gamma^5}{2} F_{\text{nem } j} + \text{h.c.} \right) + \\
 & + \sum_{j=t,b} \frac{gm_f^j}{\sqrt{2}m_w} \cdot (\sin^2 \gamma_f^j \cdot \text{ctg } \beta - \cos^2 \gamma_f^j \cdot \text{tg } \beta) \cdot (\pm H^\circ) \cdot \tilde{F}_b \cdot i\gamma^5 \cdot F_b - \\
 & - \sum_{j=t,b} \frac{gm_f}{2m_w} \cdot \left(\frac{\cos^2 \gamma_f^j}{\cos \beta} - \frac{\sin^2 \gamma_f^j}{\sin \beta} \right) \cdot \tilde{F}_j F_j \Phi^\circ - \\
 & - \sum_{j=t,b} \frac{gm_f}{2m_w} \cdot \left(\frac{\sin^2 \gamma_f^j}{\sin \beta} \cos \alpha - \frac{\cos^2 \gamma_f^j}{\cos \beta} \sin \alpha \right) \cdot \tilde{F}_j H_j \cdot h^\circ \quad \left[\pm = \begin{Bmatrix} + & (b) \\ - & (t) \end{Bmatrix} \right]. \quad (4.14)
 \end{aligned}$$

Ebből látható, hogy h° és Φ° skalár, H° pedig pszeudoskalár.

2. — a vektor-Higgs—Higgs vertexek

$$\begin{aligned}
 & - \frac{ig}{2} \sin(\alpha + \beta) \cdot [W_\mu^+ (\bar{H}^+ \tilde{\partial}^\mu \Phi^\circ) - \text{h.c.}] + \frac{ig}{2} \cos(\alpha + \beta) \cdot W_\mu^+ \cdot [\bar{H}^+ \cdot \tilde{\partial}^\mu h^\circ - \text{h.c.}] + \\
 & + \frac{g}{2} [W_\mu^+ \cdot (H^\circ \tilde{\partial}^\mu H^+) + \text{h.c.}] + \frac{ig}{2} \cdot \frac{\cos 2\theta_w}{\cos \theta_w} \cdot Z_\mu \cdot (\bar{H}^+ \tilde{\partial}^\mu H^+) - ie A_\mu \cdot (H^+ \tilde{\partial}^\mu \bar{H}^+) + \\
 & + \frac{g}{2 \cos \theta_w} \cdot \cos(\alpha + \beta) \cdot Z_\mu \cdot (h^\circ \tilde{\partial}^\mu H^\circ) - \frac{g}{2 \cos \theta_w} \cdot \sin(\alpha + \beta) \cdot Z_\mu \cdot (H^\circ \tilde{\partial}^\mu \Phi^\circ). \quad (4.15)
 \end{aligned}$$

3. — a vektor-vektor—Higgs csatolások

$$\begin{aligned}
 & \frac{gm_w}{\sqrt{2}} \cos(\alpha + \beta) \bar{W}^\lambda W_\lambda \Phi^\circ + \frac{gm_w}{\sqrt{2}} \sin(\alpha + \beta) \bar{W}^\lambda W_\lambda h^\circ + \\
 & + \frac{gm_z}{2\sqrt{2} \cos \theta_w} \cos(\alpha + \beta) \cdot \Phi^\circ Z^\lambda Z_\lambda + \frac{gm_z}{2\sqrt{2} \cos \theta_w} \sin(\alpha + \beta) \cdot h^\circ Z^\lambda Z_\lambda. \quad (4.16)
 \end{aligned}$$

Látható, hogy H° -nak ilyen csatolása nincs.

4. — a 2 vektor-2 Higgs csatolások (ezek másodrendűek)

$$\begin{aligned}
 & \left(\frac{g \cos \theta_w - g' \sin \theta_w}{2} \right)^2 \cdot Z^\lambda Z_\lambda \cdot H^+ H^- + e^2 \cdot A^\lambda A_\lambda \cdot H^+ H^- + \frac{g^2}{2} \bar{W}^\lambda W_\lambda \cdot H^+ H^- + \\
 & + 2e \frac{g \cos \theta_w - g' \sin \theta_w}{2} \cdot A^\lambda Z_\lambda \cdot H^+ H^- + \frac{eg}{2} \sin(\alpha + \beta) \cdot (H^- \Phi^\circ \cdot W^\lambda A_\lambda + \text{h.c.}) + \\
 & + \frac{gg' \sin \theta_w}{2} \sin(\alpha + \beta) (H^- \Phi^\circ W^\lambda Z_\lambda + \text{h.c.}) - \frac{eg}{2} \cos(\alpha + \beta) (H^- h^\circ W^\lambda A_\lambda + \text{h.c.}) -
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{gg' \sin \theta_w}{2} \cos(\alpha + \beta) (H^- h^\circ W^\lambda Z_\lambda + \text{h.c.}) - \frac{ieg}{2} (H^- H^\circ W^\lambda A_\lambda - \text{h.c.}) - \\
& -i \frac{gg' \sin \theta_w}{2} (H^- H^\circ W^\lambda Z_\lambda - \text{h.c.}) + \frac{g^2}{2} (H^\circ)^2 \bar{W}^\lambda W_\lambda + \frac{g^2}{4} (h^\circ)^2 \bar{W}^\lambda W_\lambda + \\
& + \frac{g^2}{4} (\Phi^\circ)^2 \bar{W}^\lambda W_\lambda + \frac{(g \cos \theta_w + g' \sin \theta_w)^2}{8} Z^\lambda Z_\lambda (H^\circ)^2 + \\
& + \frac{(g \cos \theta_w + g' \sin \theta_w)^2}{8} (h^\circ)^2 Z^\lambda Z_\lambda + \frac{(g \cos \theta_w + g' \sin \theta_w)^2}{8} Z^\lambda Z_\lambda (\Phi^\circ)^2. \quad (4.17)
\end{aligned}$$

5. — és végül a Higgs potenciálból keletkező Higgs öncsatolások

$$\begin{aligned}
& \hat{g}_1 H^+ H^- h^\circ + \hat{g}_2 H^+ H^- \Phi^\circ + \hat{g}_3 (H^\circ)^2 h^\circ + g_4 h^\circ (\Phi^\circ)^2 + \hat{g}_5 (h^\circ)^2 \Phi^\circ + \hat{g}_6 (h^\circ)^3 + \\
& + \hat{g}_7 (H^\circ)^2 \Phi^\circ + \hat{g}_8 (\Phi^\circ)^3 + g_1 H^+ H^- h^\circ \Phi^\circ + g_2 H^+ H^- (h^\circ)^2 + g_3 H^+ H^- (H^\circ)^2 + \\
& + g_4 H^+ H^- (\Phi^\circ)^2 + g_5 (H^+ H^-)^2 + g_6 h^\circ \Phi^\circ (H^\circ)^2 + g_7 h^\circ (\Phi^\circ)^3 + g_8 (h^\circ)^2 (H^\circ)^2 + \\
& + g_9 (h^\circ)^2 (\Phi^\circ)^2 + g_{10} (h^\circ)^3 \Phi^\circ + g_{11} (h^\circ)^4 + h_{12} (H^\circ)^2 (\Phi^\circ)^2 + g_{13} (H^\circ)^4 + g_{14} (\Phi^\circ)^4. \quad (4.18)
\end{aligned}$$

A g_j és \hat{g}_j állandók értékét a függelékben közöljük.

Mivel az impulzusreprezentációra való áttérés triviális (reprezentációkban $(-i)$ -vel való szorzás), így csak a deriváltcsatolások esetében közöljük a vertexeket (az impulzusokat a részecske nevével jelöljük; irányításuk *befelé* a nyíl a töltésáramlás irányát jelzi):

	$-\frac{ig}{2} \sin(\alpha + \beta) (\Phi_\mu^\circ - H_\mu^\pm)$		$+\frac{ig}{2} \sin(\alpha + \beta) \cdot (\Phi_\mu^\circ - H_\mu^\pm)$
	$\frac{ig}{2} \cos(\alpha + \beta) (h_\mu^\circ - H_\mu^\pm)$		$-\frac{ig}{2} \cos(\alpha + \beta) (h_\mu^\circ - H_\mu^\pm)$
	$-\frac{g}{2} \cdot (H_\mu^\circ - H_\mu^\pm)$		$-\frac{g}{2} \cdot (H_\mu^\circ - H_\mu^\pm)$

$$\begin{aligned}
 & \frac{g}{2 \cos \theta_w} \cos(\alpha + \beta)(H_\mu^\circ - h_\mu^\circ) & -\frac{g}{2 \cos \theta_w} \sin(\alpha + \beta)(\Phi_\mu^\circ - H_\mu^\circ) \\
 & \frac{ig \cos 2\theta_w}{2 \cos \theta_w} (H_{\mu 2}^\pm - H_{\mu 1}^\pm) & + il(H_{\mu 2}^\pm - H_{\mu 1}^\pm)
 \end{aligned}$$

A két dublettes modell az egy dublettes 1 szabad paraméterével (m_H) szemben 4 szabad tömeget és két keverési paramétert tartalmaz (α, β), továbbá minden fermionhoz egy γ_f szöget. A nagyszámú paraméter miatt pontos kísérleti jóslatokat adni meglehetősen nehéz. Ezen persze mindig lehet segíteni (semmivel sem indokolt) speciális paraméterválasztással, ilyen lehet $\gamma_f=0$ és $\beta \ll 1$ választása. Ebben az esetben a fermionok és vektorbozonok különböző tömegskálája magyarázatot nyer azzal, hogy a két dublett szimmetriasértése — melyek közül a fermionok csak az egyikhez csatolódnak — eltérő nagyságrendű. Ilyenkor a $\sin^{-1} \beta$ faktorok miatt a fermion-Higgs csatolások nem feltétlenül kicsik, mint a minimális modellben.

A következő fejezetben látni fogjuk, hogy a Higgs tömegekre adott kb. 10 GeV-os alsó korlát csak a legkönnyebb Higgsre vonatkozik. Persze, a kis m_h tömeg és kis β egyszerre való érvényességét ki kell zárunk, mivel ekkor a h jelentős járulékot adna a τ bomláshoz.

5. TÖMEGKORLÁTOK A HIGGS RÉSZECSEKÉRE

A Higgs-szektor kísérleti kimutatásának legnagyobb problémáját a Higgs-tömeg jelenti. Ennek értékére csak egészen tág korlátokat lehet adni, a kimutatásra alkalmas folyamatokat így a tömeg függvényében kell tárgyalni.

5.1. Felső korlátok

Amint láttuk, a Higgs részecske rendeltetése a fizikai elméletben a maradék divergenciák eltávolítása, tehát az elmélet renormálhatóvá tétele. Nyilvánvalónak látszik tehát, hogy a Higgs sektortól meg kell követelni, hogy a renormálhatóságot ne rontsa el. Nagy Higgs tömeg esetén azonban parciális hullám unitaritás sértés lép fel [32, 33]. A W^+W^- rugalmas szórásban például $s \rightarrow \infty$ -nél longitudinálisan polarizált bozonokra a γ , Z és H cserés folyamatok s -sel lineárisan növekednek, és összegzésük után a vezető divergencia kiesik ugyan, de a maradék tag

$$T = -\frac{8\sqrt{2}}{9} G_F m_H^2 \quad (s \gg m_H^2). \quad (5.1)$$

A parciális hullám unitaritás

$$T_j = 16\pi(2j+1) P_j(\cos \vartheta); \quad |t_j| \leq 1 \quad (5.1)$$

akkor teljesül, ha

$$m_H^2 \equiv \frac{8\pi\sqrt{2}}{3G_F} = (1,14 \text{ TeV})^2. \quad (5.3)$$

Ha a H tömege ennél mégis nagyobb, bizonyul, akkor a perturbációs elmélet — az erős kölcsönhatáshoz hasonlóan — nem bizonyul helyesnek, és várható erős csatolások és rezonanciaállapotok fellépése az 1 TeV feletti tartományban.

A több dublettes modellek esetén külön feltételeket lehet levezetni az egyes fizikai Higgsek tömegére. Ezek az értékek általában $1 \div 2$ TeV között vannak.

5.2. Alsó korlátok

A jelenlegi kísérleti körülmények között az említett felső korlátoknak experimentális jelentősége nincs. Igen fontosak azonban a megadható alsó korlátok, melyek egyrészt korlátozzák a vizsgálandó tartományt, másrészt jelentős kozmogóniai vonatkozásokra hívják fel a figyelmet.

A legalacsonyabb (és egyben biztosnak tekinthető) korlátokat az eddigi kísérletek adják. A neutron-elektron szórás adatai $m_H > 0,7$ MeV korlátot adnak [34], majd a $0^+ \rightarrow 0^+$ magátmenetekben sikerült $1 \text{ MeV} < m_H < 18 \text{ MeV}$ -et kizárni [35–36]. A kis Higgs-tömeg nem fér össze a kis energiájú neutronmag szórással, a levezetett valószínű korlát $m_H > 13 \text{ MeV}$ [37]. A fenomenológiai korlátok szerint tehát 0 (15 MeV) felett van a Higgs-tömeg.

Ennél lényegesen magasabb korlátot lehet kapni a vákuum stabilitásának és a perturbatív korrekcióknak a figyelembevételével. Az ugyanis a helyzet, hogy a magasabb rendű korrekciók módosítják a $V(\Phi)$ Higgs potenciált. Összegezve mindazon folyamatokat, amelyek csak Higgs külső lábakkal rendelkeznek, kapjuk [38]

$$V_{\text{eff}}(\Phi) = -\mu^2 |\Phi|^2 + \frac{|\Phi|^4 \ln(|\Phi|^2/M^2)}{16\pi^2 v^2} \sum_V (3m_V^4 + m_H^4 - 4 \sum_f m_f^4), \quad (5.4)$$

ahol v a szimmetriasértés mértéke, μ és M a nem renormált paraméterek. A szimmetriasértés mértékét

$$\left. \frac{\partial V_{\text{eff}}(\Phi)}{\partial \Phi} \right|_{\Phi=v/\sqrt{2}} = 0 \quad (5.5)$$

határozza meg. Ha most az effektív potenciál által meghatározott vákuum stabilitását követeljük meg, akkor

$$V(v/\sqrt{2}) < V(0). \quad (5.6)$$

Ez a korlát a Higgs tömegekre az

$$m_H = \left. \frac{\partial^2 V}{\partial \Phi^2} \right|_{\Phi=v/\sqrt{2}} > \frac{3 \sum_V m_V^4}{16\pi^2 v^2} = (7 \text{ GeV})^2 \quad (5.7)$$

korlátot adja, ha a fermionok tömege m_W mellett elhanyagolható. Ha nagyon nehéz, m_W tömegű kvark is létezik, akkor ez a korlát nem érvényes. Linde [39] felhívja a figyelmet arra, hogy a sűrűlt vákuumnak nem kell igazán stabilnak lennie, elegendő legalább $1,4 \cdot 10^9$ évnél hosszabb élettartamú metastabil vákuum. Ez lecsökkenti

a Higgs tömegkorlátot 260 MeV értékre. Fennáll ugyanakkor az a lehetőség, hogy az Univerzum kezdeti állapotában a magas hőmérsékletnek megfelelően [40] szimmetrikus vákuum volt jelen, majd az fokozatosan átment az eltolt vákuumba. Ez az átmenet — tekintettel a nagy téridő tartományokra — „buborékdiffúzió” formájában játszódhatott le. Az univerzumban esetleg megmaradó „sejtszerkezetet” a megfigyelések nem mutatják, azonban a megfigyelési szelekciók (interstelláris abszorpció) és a távolságmeghatározási módszerek nagy pontatlansága miatt azt kizárni nem lehet. Az ilyen „lyukban” a kvarkok és leptonok tömege zérus, így — ha egyáltalán kötött hadronikus állapotok létrejönnek — azok tömege és az anyagtól jövő esetleges sugárzás szintképe gyökeresen eltér a megszokottól. Valószínűleg egyszerűen galaxisokat nem tartalmazó területeket kell találnunk.

A kozmogóniai szempontból jelentős másik dolog akkor lép tel, ha a kezdeti állapotban már sértett volt az $SU(2) \times U(1)$ szimmetria. Ez Linde [39] szerint csak abban az esetben lehetséges, ha az univerzum leptonszám — aszimmetriája a barionszám-aszimmetriánál lényegesen nagyobb:

$$\Delta L > 10^8 \cdot \Delta B. \quad (5.8)$$

Ez azt jelenti, hogy — mivel a töltésszimmetria hiánya megköti az elektronok számát — a neutronok sűrűsége az univerzumban

$$n_\nu - n_{\bar{\nu}} > 200 \text{ cm}^{-3}. \quad (5.9)$$

Ez a neutrínó nyugalmi tömegének ismeretében egy, az eddig ismert anyagsűrűségénél 2-3-szor nagyobb háttér neutrínó sűrűséget jelent. Ez lényegében egybevág a hiányzó tömeg más módszerekkel történő becslésével (galaxisok rotációja és galaxishalmazok stabilitása).

Az alacsony tömegű Higgs-részecske felfedezése komoly kozmogóniai következményekkel jár, célszerű volna tisztázni az univerzum keletkezése óta végbemenő esetleges vákuumátmenet(ek) kozmogóniai következményeit.

6. HIGGS KELTÉS ÉS BOMLÁS [46]

Ebben a fejezetben áttekintjük azokat a főbb folyamatokat, amelyekben a Higgs részecskét kelteni lehet, megvizsgáljuk a bomlásból keletkező részecskéket. A Higgs bozon felfedezésénél a következő alapvető nehézségekkel kell megküzdeni:

1. A Higgs részecské(k) tömegéről csak a $15 \text{ MeV} (8 \text{ GeV?}) < m_H < 1 \text{ TeV}$ határokat tudjuk, ugyanakkor a Higgs-bomlás domináns csatornája a szokottnál jobban függ a tömegétől.

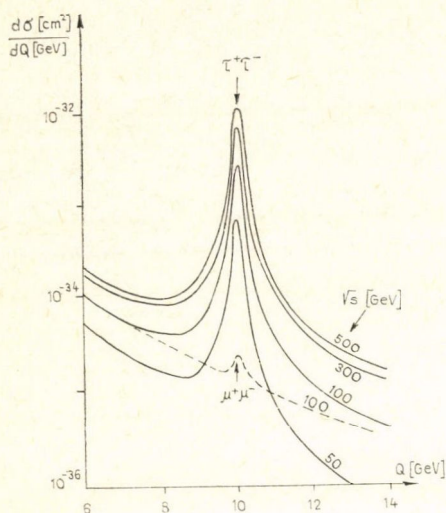
2. Az ismert részecskékhez való csatolódája gyenge, így keltése nehéz.

3. A hadronikus bomlástermékekből nehéz visszakövetkeztetni H -ra.

Drell és Yan [43] p^+p^- és e^+e^- ütközésekben vizsgálta a nehéz leptonpár keltését. Ebben jelentős szerepe lehet a H keltésnek, ahol azután H az elérhető legnehezebb leptonpárra bomlik:

$$q\bar{q} \rightarrow (H, \gamma) \rightarrow \mu^+\mu^-(\tau^+\tau^-)L^+L^-.$$

Datta és Bondyopadhyay [44] megvizsgálta a folyamatot e^+e^- ütközésekben. A $q\bar{q}$ mellett kifutó hadronok vizsgálata felesleges, ezért a hiányzó Q tömeg grafikonon kell H -nak jelentkeznie (5. ábra).



5. ábra

$$\frac{d\sigma[e^+e^- \rightarrow (h^0, \gamma) \rightarrow l\bar{l}]}{dQ (= \sqrt{(l_1 + l_2)^2})} \quad m_{h^0} = 10 \text{ GeV-nál} \quad \beta = 0,025$$

Amint látjuk, a $\mu^+\mu^-$ csúcs kicsi, és ezt ráadásul elfedik a $\tau^+\tau^-$ keltésből és τ szekvenciális bontásából származó $\mu^+\mu^-$ hátter. A $\tau^+\tau^-$ csúcs nehézségek árán, de a LEP-en észlelhető lesz, ha H tömege nem haladja meg a ~ 50 GeV-ot. Az ábra $m_H = 10$ GeV feltételezéssel készült a 2 dublettes modellben a $H \rightarrow h'$ részecskére. Az egy dublettes modellben egy nagyságrenddel kisebb a hatáskeresztmetszet, de észlelése még nem lehetetlen.

Ha a Higgs-tömeg nem éri el a $m_H < 7 \div 8$ GeV-ot, akkor a $\gamma(9.5)$ bomlásában érdemes kétleptonos végállapotoakat keresni [45],

$$\frac{\sigma(e^+e^- \rightarrow \gamma(9.5) \rightarrow H\gamma)}{\sigma(e^+e^- \rightarrow \gamma(9.5) \rightarrow \mu^+\mu^-)} = 0,007 \sqrt{1 - m_H^2/m_\gamma^2}.$$

A helyzet még jobb lesz, ha sikerül a $t\bar{t}$ állapotot megtalálni, ekkor az előző arányt még a

$$(m_t/m_b)^2 \sim 40$$

számmal kell szorozni, és az m_H felső korlátja is nagyobb (20 GeV).

Kis m_H tömeg esetén ($15 \text{ MeV} < m_H < m_\pi$) a $p\pi$ szórásban [46]

$$\frac{d\sigma}{dt}(\pi^- p^+ \rightarrow Hn) \simeq \frac{10^{-7}}{s \cdot (p\pi)_{cM}^2},$$

a további $H \rightarrow e^+e^-$ bomlás útján látható (itt meg kell jegyeznünk, hogy bár a Hee csatolás igen kicsi, azt az egyhurok járulékok sokszorosára növelik, míg a több hurok járulékok már nem okoznak renormálhatatlan divergenciát).

A néhány GeV-os tartományban Ellis et al javasolta ugyanazt a reakciót, de úgy tűnik, hogy itt a Drell—Yan folyamat nagyobb hatáskeresztmetszetet szolgáltat.

Ha $m_H \gtrsim 1$ GoV, akkor a K_L^+ bomlásában

$$\frac{\Gamma(K_L^+ \rightarrow \pi^+ H)}{\Gamma_{\text{tof}}(K_L^+)} \approx 10^{-7},$$

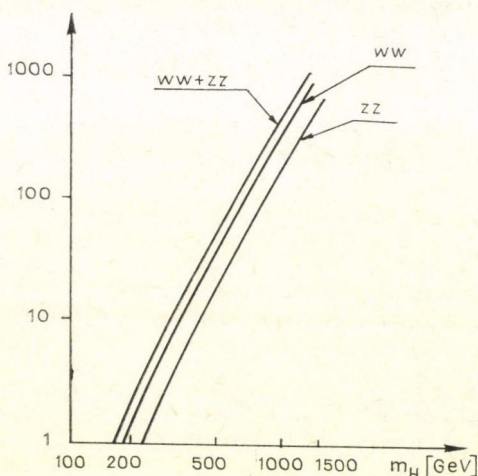
ami kb. megfelel a már észlelt $K^+ \rightarrow \pi^+ e^+ e^-$ elágazási aránynak.

Megvizsgálva a külső fermionlábakról történő Higgs Bremsstrahlung keltést, azt látjuk, hogy a bejövő és kifutó vonalakról kisugárzott Higgs interferenciája negatív, a keltés erősségét a fermiontömeg változása szabja meg. Ezért reálisan Bremsstrahlung keltést csak a kifutó W és Z -ről várhatunk.

Érdekes folyamat az $e^+e^- \rightarrow V \rightarrow VH$, ahol $V=Z$ vagy valamely keskeny vektormezon. Erre érvényes

$$BR = \frac{\sigma(e^+e^- \rightarrow V \rightarrow VH)}{\sigma(e^+e^- \rightarrow V \rightarrow \mu^+\mu^-)} = \begin{cases} \frac{17}{\sqrt{m_H^2 + \frac{1}{4}\Gamma_Z^2}} & (V=Z, \sqrt{s}=m_Z) \\ \frac{1}{20} \left(\frac{m_v}{m_p}\right)^2 \frac{\Gamma(V \rightarrow e^+e^-)}{m_H} & (V=\text{vektormezon}) \end{cases}$$

A 3,1 GeV vektorrezonanciára így $1,6 \cdot 10^{-6}/m_H [\text{GeV}]$ adódik, míg az $e^+e^- \rightarrow Z \rightarrow ZH$ folyamat csak $\sqrt{s} \cong m_Z$ környékén válik jelentőssé, majd nagyobb m_H -ra $BR \cong 0,1$!



6. ábra. A $H \rightarrow ZZ, WW$ bomlási szélesség

A Higgs-bozon bomlási módja még jobban függ m_H -tól. A bomlás mindig a kinematikailag megengedett legnagyobb tömegű lepton, kvark, Will, Z bozon párra, ill. azok termékeire történik a csatolási állandó tömegarányos volta miatt. $15 \text{ MeV} < m_H < 2m_\mu$ -nél $H \rightarrow e^+e^-$ dominál,

$$\Gamma(H \rightarrow e^+e^-) = 1,7 \cdot 10^{-13} \cdot m_H \left(1 - \frac{4m_e^2}{m_H^2}\right)^{3/2},$$

azonban $m_H > 2m_\mu$ -nél azonnal $H \rightarrow \mu^+\mu^-$ válik nagyobbá:

$$\Gamma(H \rightarrow \mu^+\mu^-) = 7,3 \cdot 10^{-9} \cdot m_H \left(1 - \frac{4m_\mu^2}{m_H^2}\right)^{3/2}.$$

Már $m_H < 2 \text{ GeV}$ -nál figyelembe kell venni H hadronikus bomlási módjait. Ekkor

$$\frac{\Gamma(H \rightarrow \pi\pi)}{\Gamma(H \rightarrow \mu\mu)} \sim \left(\frac{m_\pi}{m_\mu}\right)^3 \sqrt{1 - \frac{4m_\pi^2}{m_H^2}}.$$

Megfelelően a $\pi\pi$ küszöb felett rögtön $\pi\pi$ dominál.

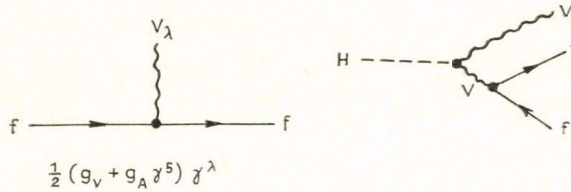
Az 1 GeV feletti m_H esetén várhatóan $H \rightarrow \bar{s}s$ észlelhető. Ekkor végállapotban ritka részecskék megjelenése várható. A ~ 4 GeV körüli $c\bar{c}$ küszöb felett jellemzővé válik a charm részecskék keltése, stb. Ha m_H eléri a WW küszöböt, akkor ($m_H \cong 150$ GeV) az lesz a domináns bomlás. Ennek teljes szélességét mutatja a 6. ábra. Az $m_H > 200$ GeV tartományban a $WW + ZZ$ bomlás lényegében a teljes hatás-keresztmetszetet adja, a teljes hatáskeresztmetszet alakulását kisebb m_H -ra a 3. táblázatból vehetjük (ll. 7.2 pont).

A továbbiakban megvizsgáljuk a $H \rightarrow VV \rightarrow Vll$ bomlási módot.

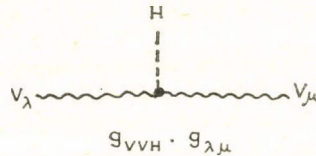
6.1. $H \rightarrow Vff$

Az alábbiakban a nehéz ($m_H > 100$ GeV) Higgs bomlásában megvizsgáljuk, hogy nem lehetséges-e H bomlása tömeghajtól távol eső V vektorbozonon keresztül. Ennek a folyamatnak a küszöbértéke kisebb $2m_V$ -nél. A $H \rightarrow Vff$ bomlási szélességre egyébként is szükség van a $H \rightarrow VV$ bomlás kísérleti vizsgálatok, ha két fermion-szignatúrát akarunk V -re ($V=W, Z$).

A megfelelő Feynman-gráf



és a csatolások



Ezzel a kisugárazott V vektorbozon energiaeioszlása

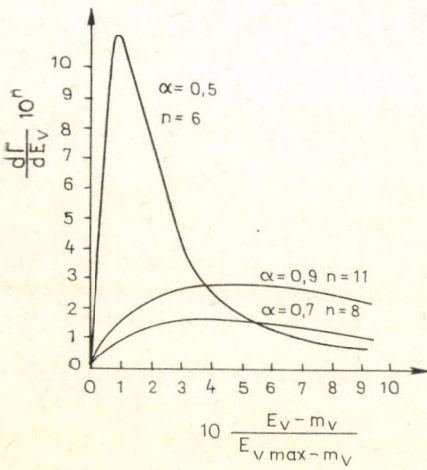
$$\frac{d\Gamma}{dE_V}(H \rightarrow V l_1 l_2) = \frac{G_F(g_V^2 + g_A^2)m_V^5}{\sqrt{2} \cdot 24\pi^3 m_H^3} \cdot \sqrt{\frac{E_V^2}{m_V^2} - 1} \cdot \frac{\delta\left(\frac{E_V^2}{m_V^2} - 1\right) + 1 + \frac{m_V^2}{m_H^2} - 2 \cdot \frac{E_V}{m_V}}{\left(1 - 2 \frac{E_V}{m_H}\right)^2 + \frac{4\Gamma_V^2}{m_H^2}}, \quad (6.1)$$

ahol a propagátornevezőben figyelembe vettük V véges szélességét. A fizikai tartomány

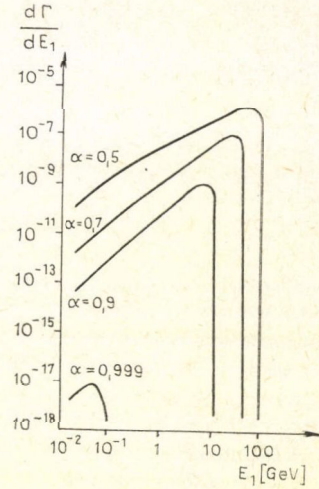
$$m_V \leq E_V \leq \frac{m_H^2 + m_V^2}{2m_H} \equiv E_{V_{\max}}. \quad (6.2)$$

A (6.1) kifejezésben a longitudinális V -re $\delta=1$, a transzverzálisra $\delta=0$. A g_{VVH} értéke Z -re van helyettesítve. A (6.1) kifejezést mutatja a 7a ábra. Látjuk, hogy $\alpha=m_Z/m_H$ növekedtével egyre kisebb energián egyre élesebb maximum fedezhető fel. A 7b ábra az E_1 lepton-spektrumot mutatja. Ekkor

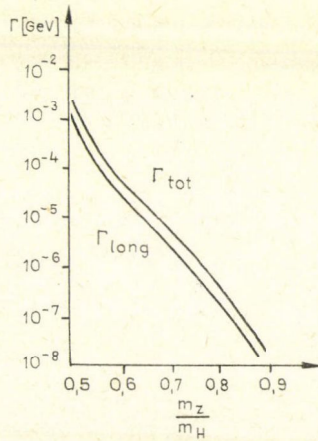
$$\frac{d\Gamma}{dE_1}(H \rightarrow \nu l_1 \bar{l}_2) = \frac{G_F(g_V^2 + g_A^2)m_V^2}{32 \cdot \sqrt{2} \cdot \pi^3 \cdot \alpha^3} \cdot x^2 \cdot (\alpha^2 - 1 - 2\alpha x)^2 \times \\ \times \int_0^2 dz \cdot \frac{2\alpha^2 + (2 - \alpha^2) \cdot Z}{\left(\frac{1}{\alpha} - xz\right) \cdot [(1 - x \cdot (\alpha - 2x) \cdot z)^2 + 4\Gamma_V^2/m_V^2]}, \quad (6.3)$$



7a. ábra



7b. ábra



8. ábra

ahol a fizikai tartomány

$$0 < x = \frac{E_1}{m_V} < \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\alpha} - \alpha \right), \quad 0 < \alpha < \frac{m_V}{m_H} < 1. \quad (6.4)$$

E (6.4) kifejezés numerikus integrálásával kapjuk a teljes bomlási szélességet, melyet a 8. ábra mutat. Láthatjuk, hogy $\alpha > 0,5$ -nél, azaz $m_H < 2m_Z$ -nél a szélesség gyorsan csökken, így a V vektorbozonok gyakorlatilag csak tömeghéjon sugárzódnak ki. A tömeghéjat elérve, $\alpha \approx 0,5$ -nél viszont a parciális szélesség már eléri a 10 MeV-et is.

7. FOTONOK A HIGGS RÉSZECSCKE BOMLÁSÁBAN

Mint az előző fejezetben láttuk, az irodalom lényegében kimerítően tárgyalja a Higgs-részecske jelentős bomlásait. E bomlások legnagyobb része töltött részecskés végállapotba történik, ugyanis H a ZZ páron kívül más semleges részecskéhez nem csatolódik. A töltött részecskékről pedig mindig várható egy vagy több foton kisugárzódása.

A töltött részecskékről kisugárzódó foton vizsgálható a fékezési sugárzás közeli körülményekben, amikor a foton energia elég kicsi ahhoz, hogy ne befolyásolja a reakció kinematikáját. Ekkor az eredmény csak a kisugárzott töltött részecskétől függ, és könnyen számítható [41]. Nagyobb energiájú foton sugárzása lehetséges akár a végállapotbeli fermionról, akár valamelyik majdnem tömeghéjon levő gyenge W bozonról. Várható, hogy még néhány GeV energiájú foton sem ad jelentős járulékot a W propagátorba. Ez megnövelheti a folyamat valószínűségét, s így számolni kell azzal, hogy kemény fotonok is keletkeznek. Ennek megvizsgálása céljából áttekintjük azokat a folyamatokat, amelyekben számottevő valószínűséggel foton keletkezhet a Higgs bomlása során.

A fotonos folyamatok jelentősége a következőkben állhat:

- minden töltött részecskés folyamatban el kell választani a fotonkeltéses folyamatokat,
- a kialakuló fotonspektrum alapján jelzést kaphatunk a Higgs részecskére.

A fotonkeltési folyamatok a perturbációszámítás szerint kis energián divergálnak. Ezen infravörös divergenciák oka lényegében a perturbációszámítás klasszikus formájának alkalmazhatatlanságában áll: a perturbációs sort nem az

$$e^2 = 4\pi \cdot \alpha \cdot \hbar c$$

állandó, hanem a [42]

$$e^2 \ln \frac{E_{\text{töltés}}}{E_{\gamma}^{\min}} = 4\pi\alpha \cdot \ln \frac{E_{\text{töltés}}}{E_{\gamma}^{\min}} \quad (7.1)$$

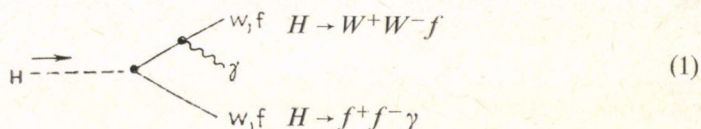
sorfejtési állandó jellemzi. Ez pedig elég kis fotonenergián 1-nél nagyobbá is válhat. Mivel számunkra úgyszólván csak az 1 GeV feletti tartomány érdekes, ezért az infravörös divergenciákat itt levágással távolítjuk el. Amennyiben a sorfejtési állandó még kicsi, de a fotonos folyamat a foton nélkülihez képest jelentősnek ($\lesssim 20$ – 30%) bizonyul, akkor el kell végezni a magasabb rendű korrekciók és a kétfotonos folyamatok vizsgálatát is. Erre azonban — mint az alábbiakban látni fogjuk — nem lesz szükség.

7.1. A folyamatok áttekintése

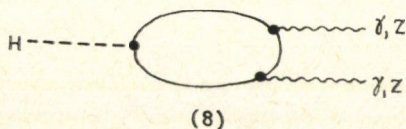
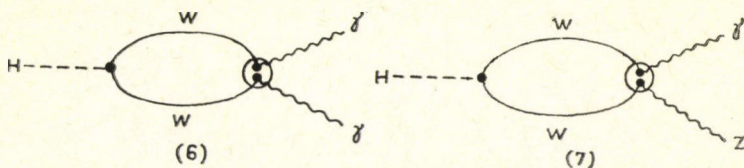
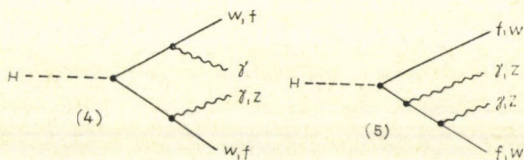
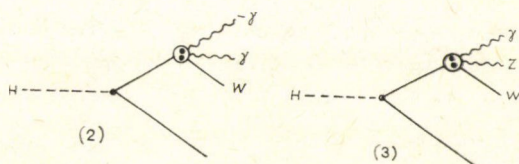
Felsoroljuk mindazon Higgs-bomlási folyamatokat, amelyekben fotonok keletkezhetnek, és kiválasztjuk közülük azokat, amelyek nem tekinthetők egy alacsonyabb rendű folyamat korrekciójának.

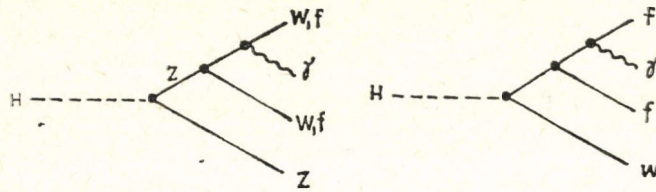
A Higgs-részecske nincs közvetlen kölcsönhatásban a fotonokkal, csak a W , Z bozonokkal, a leptonokkal és a kvarkokkal. A kvarkokat — jobb híján — elemi leptonoknak tekintjük, és erős kölcsönhatásaiktól eltekintünk. A kvark végállapotokra összegzünk, és így a továbbiakban mindenhol, ahol $f\bar{f}$, ill. $f\bar{\nu}$ végállapotról beszélünk, ott a megfelelő Σ hadron, ill. leptonos végállapotot kell érteni. A hadronokról kisugárzott fotont úgy tekintjük, mintha a szabad kvarkról sugárzódna ki. Elegendően nagy energián a kvarkpárnak a kísérletben két jet fog megfelelni.

Fotonkeltéshez elsőrendű folyamat nincs, másodrendben csak



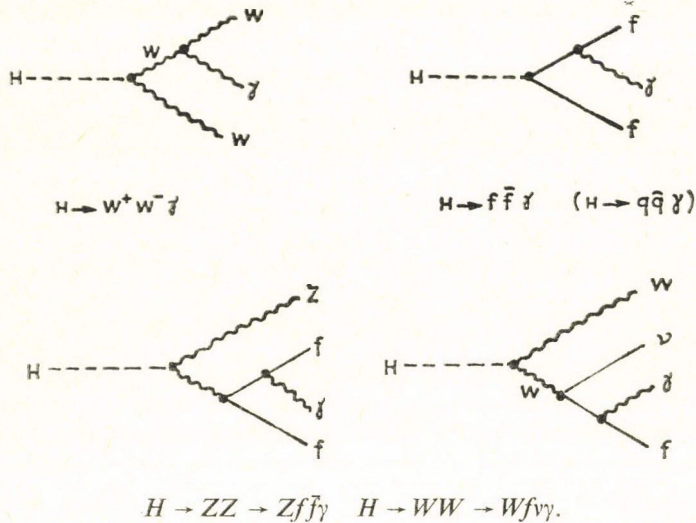
áll rendelkezésre. A lehetséges harmadrendű folyamatok





Ezek a Feynman-gráfokon \otimes -vel a g^2 -tel arányos kontakt csatolásokat jelöltük, melyeket másodrendűeknek kell tekintenünk.

A (2—5) gráfok az (1) gráf korrekcióinak tekintendők, csak akkor kell kiszámítanunk őket, ha a kétfotonos végállapotra is szükség lesz. A (6—8) gráfok, $H \rightarrow \gamma\gamma$ és $H \rightarrow \gamma Z$ folyamatokat elhanyagolhatjuk. A (9) gráf által leírt $H \rightarrow ZWW$ folyamatban a közbülső Z messze van a tömeghéjtól, így e folyamat kicsi. A számításba veendő folyamatok tehát a standard modellben



A két dublettes Higgs-modellben a helyzet lényegében analóg. Figyelembe kell venni a $H^+ H^-$ csatolást is, a vázolt célok egyike sem érhető azonban el a paraméterek nagy száma miatt: mint látni fogjuk, a Higgs-részecske észlelhetősége a csatolási állandók arányán múlik, a kísérletekhez a fotonháttérrel csak 5 ismeretlen paraméter függvényében tudnánk megadni. Ezért e folyamatok kiszámítása helyett megjegyezzük, hogy a fotonkeltéses folyamatok között van egy, amelyik lehetőséget nyújt a kontakt tagok ellenőrzésére. Mivel a kontakt tagok a potenciál spontán sérüléséből származnak, ellenőrzésük jelentős lehet. E folyamatokat, $H^0 \rightarrow W^- H^+ \gamma$, $H^+ \rightarrow W^+ H^0 \gamma$, a 7.6 részben vizsgáljuk meg.

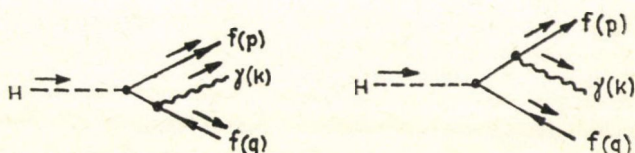
7.2. $H \rightarrow f\bar{f}\gamma$ [48]

Ebben a részben a Higgs-bozon fermionos bomlásaiban kisugárzódó foton keltési hatáskeresztmetszetét tárgyaljuk. A folyamat magában foglalja azokat az eseteket, amikor a végállapotban egy leptonpár (ill. bomlástermékei) vannak jelen a foton mellett, illetve amikor a két fermion kvark, amely valamilyen módon hadronokká alakult. Magasabb energián ekkor két kvarkjet észlelése várható.

A Higgs-fermion csatolás a kinematikailag elérhető legnehezebb fermion esetében a legnagyobb. Mivel a foton fermionvonalról mehet el, így a fermion véges szélessége — amely a fermiontömeggel várhatóan növekszik — növeli a Feynman-gráfban található propagátornevezőt. Végülis az infravörös divergencia miatti levágást az kell, hogy meghatározza, hogy melyik fermionpár járuléka lesz maximális az adott Higgs-tömeg mellett. Ki kell tehát számítanunk a folyamat teljes hatáskeresztmetszetének függését a fermiontömegetől.

A vizsgált folyamat addig tekinthető jelentősnek, amíg ennél nagyobb tömegű töltött részecskéhez nem csatolódik a Higgs-részecske. Ez $m_H \cong 150$ GeV körül következik be, ahol várhatóan $H \rightarrow WW\gamma$ fog dominálni.

A fermion- és fotonkeltés Feynmann-gráfjai



ahol a Lagrange-sűrűség megfelelő része

$$\mathcal{L}_I = -e\bar{\psi}A\psi + \sqrt{\sqrt{2}G_F} \cdot m_f \cdot \bar{\psi}\psi \cdot H. \quad (7.2)$$

A differenciális bomlási szélesség

$$d\Gamma = \frac{\sqrt{2} \cdot \alpha \cdot G_F \cdot m_f^2}{4 \cdot (2\pi)^2 \cdot m_H} \cdot dE_k \cdot dE_p \cdot (2m_f)^2 \times \\ \times \left| \bar{v}(q) \not{\epsilon} \frac{-\not{k} - \not{q} + m_f}{(k+q)^2 - m_f^2 + i\epsilon} u(p) + \bar{v}(q) \frac{\not{k} + \not{p} + m_f}{(k+p)^2 - m_f^2 + i\epsilon} \not{\epsilon} u(p) \right|^2 \quad (7.3)$$

A folyamat irányfüggetlen, ezért a 4π térszög szerint kiintegráltunk, és így csak a foton E_k és az egyik fermion E_p energiája maradt változóként. A fizikai tartományt a

$$\lambda = \frac{m_H}{m_f}, \quad y = \frac{m_H E_\gamma}{m_f^2}, \quad x = \frac{(a_\lambda k^2)}{m_f^2} \quad (7.4)$$

jelölések felhasználásával a

$$0 \leq y \leq \frac{\lambda^2}{2} - 2; \quad \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{4}{\lambda^2 - 2y}}}{2} \leq \frac{x}{y} \leq \frac{1 + \sqrt{1 - \frac{4}{\lambda^2 - 2y}}}{2} \quad (7.5)$$

határok szabják meg. A (7.3) kifejezést a kifutó fermionok polarizációjára felösszegezve kapjuk a spurók kiszámítása után:

$$d\Gamma = \frac{\alpha G_F m_f^2}{2\sqrt{2}\pi^2 m_H} \cdot dE_k dE_p \cdot \frac{1+2\frac{x}{y}}{x^2+\beta^2} \times \\ \times \left\{ \frac{x}{y} \left(1 - \frac{x}{y}\right) \cdot \left[y^2 + (\lambda^2 - 2y) \cdot \left(\frac{\lambda^2}{2} - 2\right) \right] - \left(\frac{\lambda^2}{2} - 2\right) \right\} + (x \leftrightarrow y-x). \quad (7.6)$$

Ha most az x változó szerint kiintegrálunk, akkor megkapjuk a fotonspektrumot:

$$d\Gamma = \frac{\alpha G_F m_f^6}{\sqrt{2}\pi^2 m_H^3} \cdot \frac{dy}{y} \cdot \left\{ \left[\left(\frac{1}{2} + \frac{\beta^2}{y^2} \right) \cdot \left[(\lambda^2 - 2y) \cdot \left(\frac{\lambda^2}{2} - 2 \right) + y^2 \right] - \left(\frac{\lambda^2}{2} - 2 \right) \right] \times \right. \\ \times \ln \frac{(\beta/y)^2 + \frac{(1+\sqrt{v^-})^2}{4}}{(\beta/y)^2 + \frac{(1-\sqrt{v^-})^2}{4}} - \left[\frac{\beta}{y} \cdot \left[(\lambda^2 - 2y) \cdot \left(\frac{\lambda^2}{2} - 2 \right) + y^2 \right] + \frac{y}{\beta} \cdot \left(\frac{\lambda^2}{2} - 2 \right) \right] \times \\ \left. \times \arctg \frac{(\lambda^2 - 2y) \cdot y/\beta \cdot \sqrt{v^-}}{\lambda^2 - 2y + y^2/\beta^2} \right\}; \quad v^- = \sqrt{1 - \frac{4}{\lambda^2 - 2y}}. \quad (7.7)$$

A totális bomlási szélesség megadásához ezt a kifejezést kell integrálnunk. Az integrálást numerikusan végeztük el a 7.1 részben felsorolt fermionadatokkal. Összehasonlításként használjuk a $H \rightarrow f\bar{f}$ folyamat szélességét

$$\Gamma_{H \rightarrow f\bar{f}} = \frac{\sqrt{2} \cdot G_F \cdot m_f^2 \cdot m_H}{8\pi} \cdot \sqrt{1 - \frac{4m_f^2}{m_H^2}}, \quad (7.8)$$

$$BR(\sum_f \Gamma_{H \rightarrow f\bar{f}} / \Gamma_H^{\text{tot}}) \quad (7.9)$$

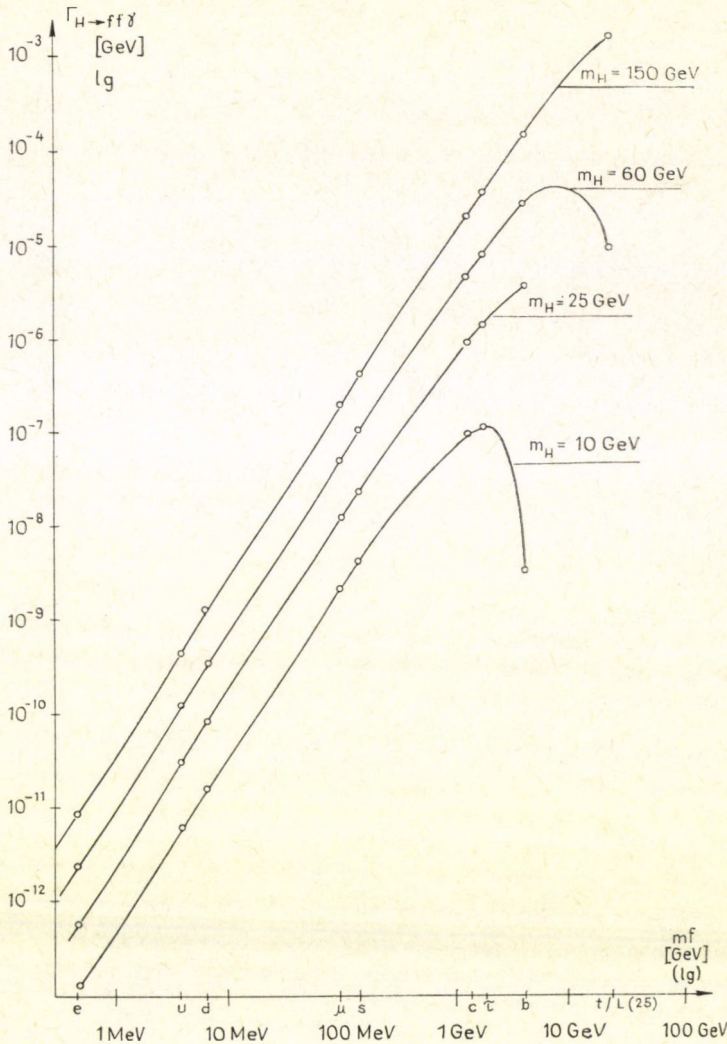
elágazási arány számításakor. Az $m_H < 150$ GeV alatti tartományban H bomlásában az $f\bar{f}$ végállapot dominál, így a teljes hatáskeresztmetszet

$$\Gamma_H^{\text{tot}} = \sum_f \Gamma_{H \rightarrow f\bar{f}}. \quad (7.10)$$

Az elágazási arányok számításánál az egyes fermionok töltését és szín összegzését figyelembe vettük. A kapott értékeket a 3. táblázat mutatja.

A számítás során a propagátornevezőkben a tömegek helyére az $m_f \rightarrow m_f - i\Gamma_f$ értéket helyettesítettük. A táblázatban megadott két adat a kvarkok (hipotetikus) 1 MeV, ill. 0,1 MeV szélességére vonatkozik.

A teljes szélesség és BR függését (egységnyi töltésre vonatkoztatva és szín összegzés nélkül) a 9–10. ábra mutatja. A szélesség a fermiontömeggel gyorsan nő. (1 MeV, ill. 0,1 MeV kvarkszélesség) 10–20%-os eltérés tapasztalható.

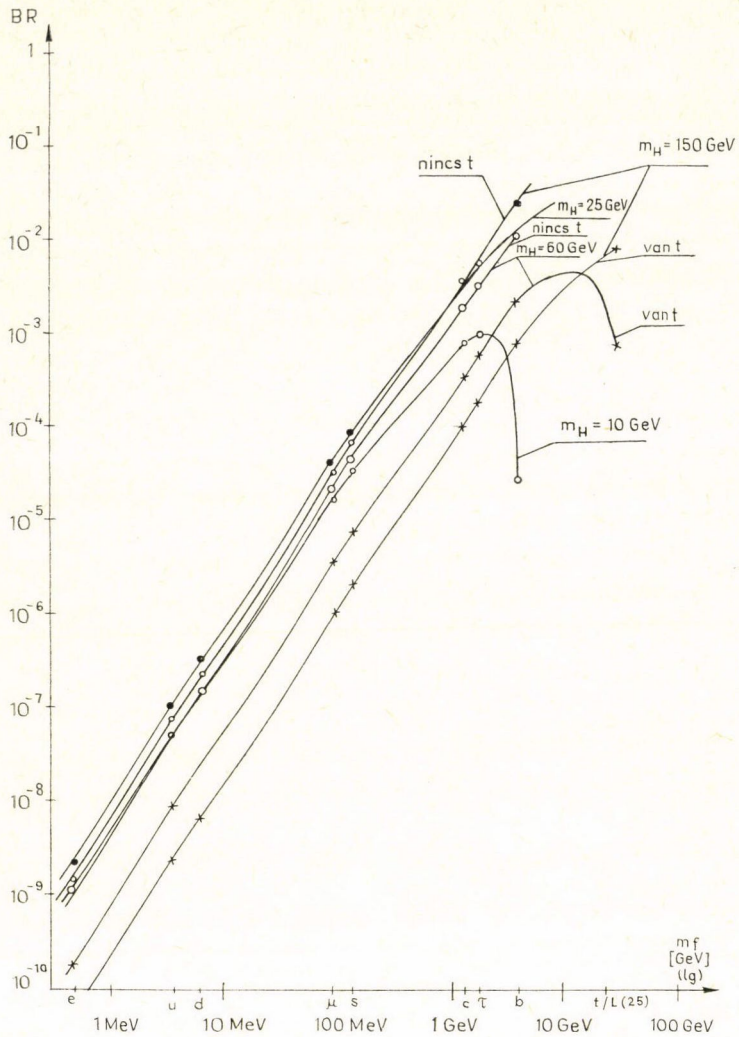


9. ábra. $\Gamma_{H \rightarrow f \bar{f}}$ versus m_f egységnyi fermion töltés, színösszegzés nincs). $E_\gamma \gg 1$ GeV

A kapott hatáskeresztmetszetek azt mutatják, hogy az egy foton keltési hatáskeresztmetszet a fotonkeltés nélküli folyamatnak csak max. 30%-át érheti el. Ennek ellenére azt kell mondani, hogy a sorfejtés

$$e^2 \cdot \ln E_p/E_k$$

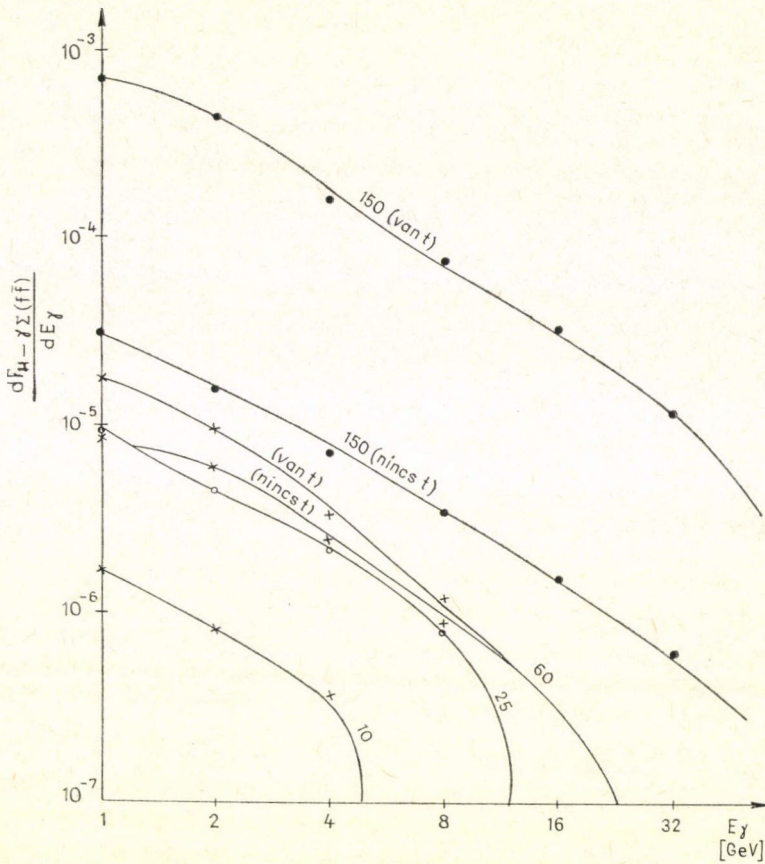
paramétere kisenergiás fotonokra — 1 GeV alatt — túlságosan magas lesz, így a levágást ide kell helyeznünk. Mivel a kisenergiás határesetben minden töltött részecskét



10. áb: a. $BR \left[\frac{H \rightarrow f\bar{f}}{(H \rightarrow \Sigma f\bar{f}) + (H \rightarrow \Sigma f\bar{f})} \right]$ versus m_f
(egységnyi fermion-töltés színösszegzés nincs). $E_\gamma \cong 1$ GeV

fotonok kísérnek, amelyek száma könnyen számítható és csak a töltött részecskétől függ (nem Higgs-specifikus) így ezek vizsgálatával nem foglalkozunk.

A (7.7)-kifejezés alapján kiszámítottuk a kisugárzó foton energiaspektrumát (11. ábra). Itt is feltüntettük a spektrum alakját, ha a t kvarkot számításba vesszük, és ha nem vesszük figyelembe.



11. ábra. A foton energiacioszlása. $H \rightarrow \gamma f \bar{f}$.
(A görbékre írt értékek m_H függvényében jelentik GeV-ban)

A várakozásnak megfelelően az eloszlás kis energián növekszik. A lefutás kb. a

$$\frac{d\Gamma}{dE_k} \sim E^{-1,15} \quad 1 \text{ GeV} < E_k < \sim 0,7 \cdot E_k^{\max} \quad (7.11)$$

kifejezésnek felel meg (a logaritmus növekedést E_k -val valóban tapasztaltuk az 1 keV körüli tartományban). Ez azt jelenti, hogy mivel $d\Gamma/d \ln E_k \sim E_k^{-0,15} \sim$ állandó, minden E_k nagyságrendre azonos számú foton esik. A fotonok tehát *nem* kis energiákon fognak főként kisugározódni (az 1 GeV feletti tartományt tekintve).

Az egyes fermionok járulékát külön nem közöljük, ezek ugyanis a 11. ábra megfelelő görbéjével párhuzamosan haladnak, így a százalékos arányuk minden E_k energián megfelel a 3. táblázatban közöltnek.

A Higgs tömegtől a folyamat hatáskeresztmetszete erősen függ. A 3. táblázat adatai szerint ez a függés erősebb, mint a megfelelő totális szélesség növekedése 60 GeV-ig. Itt a foton sugárzás aránya eléri a 10%-ot, tehát feltétlenül tekintetbe kell

3. TÁBLÁZAT

Higgs bomlási szélességek az 1. táblázat fermionjaira összegezve

m_H	$(H \rightarrow \sum f \bar{f})$	$BR(E > 1 \text{ GeV})$	$BR(E > 1 \text{ keV})$
10 GeV	$1,18 \cdot 10^{-4}$	0,21 %	$3 \div 4 \%$
25 GeV	$2,65 \cdot 10^{-4}$	2,5 %	$9 \div 12 \%$
60 GeV van t	$1,29 \cdot 10^{-3}$	2,8 %	$15 \div 20 \%$
60 GeV nincs t	$2,23 \cdot 10^{-4}$	9,6 %	$33 \div 41 \%$
150 GeV van t	0,190	1,3 %	$4 \div 6 \%$
150 GeV nincs t	$5,72 \cdot 10^{-3}$	1,9 %	$7 \div 9 \%$

 $[F_{\text{kvar}} 1 \text{ MeV} \div 0,1 \text{ MeV}]$

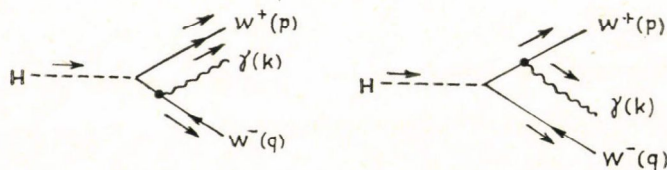
venni az esetleges kísérletekben. Nehéz, 150 GeV tömegű Higgs esetében a fotonkeltés parciális szélessége — a teljes szélességgel arányosan — igen erősen függ attól, hogy létezik-e t kvark (ill. további nehéz fermion). A jelenlegi kísérletek kizárják a 30 GeV alatti nehéz lepton létezését, ilyen részecske vagy szupernehéz kvark felfedezése esetén az $m_H = 150 \text{ GeV}$ -ra vonatkozó adat értelem szerint módosítandó: ekkor a teljes és a fotonkeltési hatáskeresztmetszet is megnövekszik.

A maximális fotonenergiát (gyakorlatilag $m_H/2$.) legalább 80%-ra megközelítő E_k érték esetén a fázistér szűkülése miatt a hatáskeresztmetszet gyorsan csökken. Ezt a levágást fel lehet használni a folyamat azonosítására.

7.3. $H \rightarrow W^+ W^- \gamma$ [47]

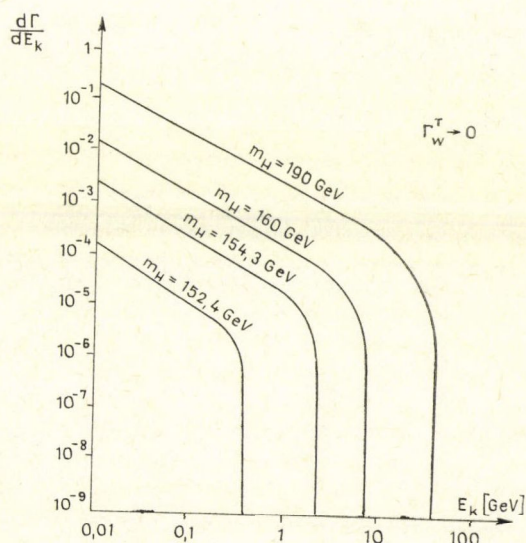
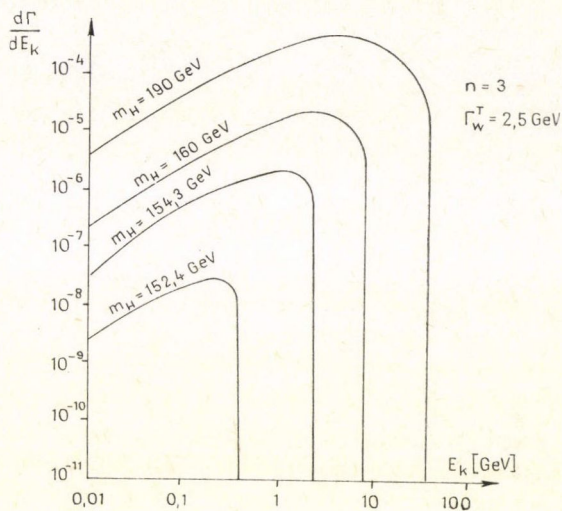
Mivel a Higgs bomlásban a vezető folyamat mindig a lehető legnagyobb tömegű bomlástermék-párra való bomlás, így $\sim 150 \text{ GeV}$ felett a fermionos folyamatnál várhatóan nagyobb lesz a WW párra és fotonra való bomlás. Ez a küszöbérték felett várható, ugyanis közvetlen a küszöb felett még a kis $WW\gamma$ fázistér elnyomja a folyamatot. A következő fejezet eredményei azt fogják mutatni, hogy kb. 200 GeV felett a domináns szerepet már $H \rightarrow ZZ \rightarrow Z f \bar{f} \gamma$ tölti be.

Ezt a folyamatot az alábbi Feynman-gráfok írják le:



ahol a vertexek

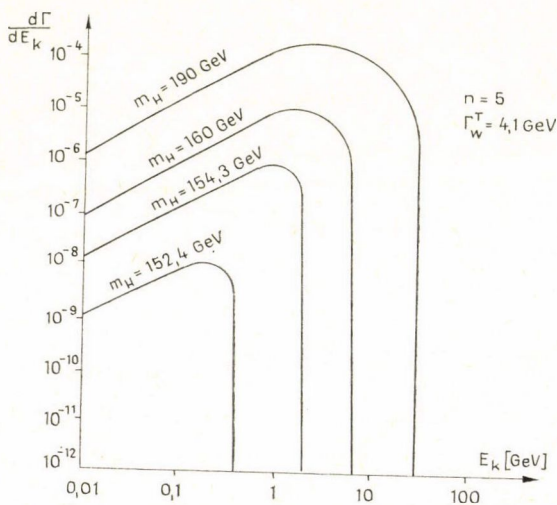
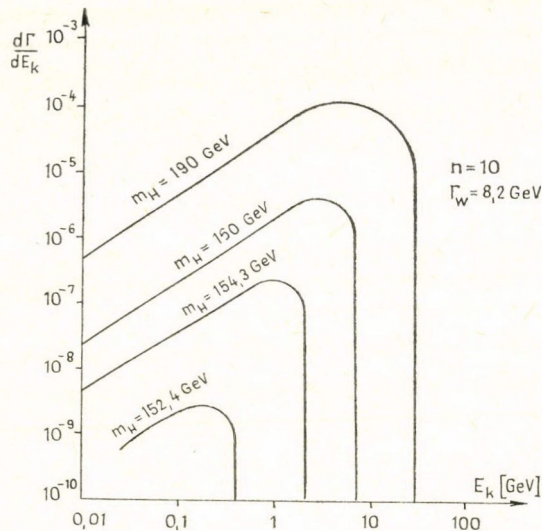
$$gm_w \cdot \varepsilon^\lambda(W_{out}) \cdot \varepsilon_\lambda(W_{in}) - ei[(k_3 - k_1)_{\mu_2} g_{\mu_3 \mu_1} + (k_2 - k_3)_{\mu_2} g_{\mu_2 \mu_3} + (k_1 - k_2)_{\mu_3} g_{\mu_1 \mu_2}].$$



12. ábra. A $\frac{d\Gamma(H \rightarrow w^+ w^- \gamma)}{dE_k}$ differenciális bomlási szélesség E_k függvényében. ($m_w = 76 \text{ GeV}$, „ n ” a fermion generációk száma)

Amint látjuk, itt is a maximális járulék kis foton energián várható a W propagátor kicsisége miatt.

Az infravörös divergencia kezelése ebben az esetben másképp történik, mint a $H \rightarrow f\bar{f}\gamma$ bomlásnál. A sorfejtési állandó itt nem $e^2 \ln(E_W/E_k)$ lesz, nem ha $e^2 \cdot \ln(E_W/\sqrt{E_k^2 + \Gamma_W^2})$, ugyanis a W propagátorokban figyelembe kell vennünk a véges bomlási szélességet, ami itt összehasonlíthatóvá válhat a foton energiájával: a standard modell szerint $\Gamma_T(W) = 0,882 \text{ GeV}$ -n, ahol n a fermion generációk száma.



13. ábra. A $\frac{d\Gamma(H \rightarrow w^+ w^- \gamma)}{dE_k}$ differenciális bomlási szélesség E_k függvényében. ($m_w = 76 \text{ GeV}$, „ n ” a fermion generációk száma)

A sorfejtési állandó max. $\sim 0,37$, így a perturbációs sorfejtés helyes eredményt szolgáltat, tehát az infravörös levágást nem kell elvégezni.

A bomlási (differenciális) hatáskeresztmetszetre igen bonyolult képletet kapunk, melynek kiintegrálását az MTA CDC 3300-as számítógépével végeztük el. Az eredményeket a 12—13. ábra mutatja.

A kapott eredmények értékelése H teljes bomlási szélességéhez viszonyítva végezhető el. Az itt jelentős tartományban két H bomlás jelentős lehet: $H \rightarrow W^+ W^-$ és $H \rightarrow f^+ f^-$. Ezek szélessége

$$\Gamma_{H \rightarrow W^+ W^-} = \frac{\alpha m_w}{8} \frac{\sqrt{\lambda^2 - 4} \cdot \left[2 + \left(\frac{\lambda^2}{2} - 1 \right)^2 \right]}{\lambda^2},$$

$$\text{ill. } \Gamma_{H \rightarrow f^+ f^-} = \frac{\sqrt{2} G_F m_H}{8\pi} \sum_f m_f^2; \quad \left(m_f \ll \frac{m_H}{2} \right).$$

Összehasonlításuk azt adja, hogy a t kvark létezése esetén $H \rightarrow ff$ dominál, t nem létezése esetén $H \rightarrow WW$ dominál. Az ezen eseteknek megfelelő elágazási arányokat a 4. táblázat mutatja.

4. TÁBLÁZAT

(mértékegység: GeV)

m_H	$\Gamma_{(H \rightarrow W^+ W^- \gamma)}^{\text{tot}}$	$\Gamma_{(H \rightarrow W^+ W^-)}$	$\Gamma_{H \rightarrow f^+ f^-}$	Γ_H^{tot}	$RR(H \rightarrow W^+ W^- \gamma)$
152	0	0	0,19	0,19	0
152,4	$8,0 \cdot 10^{-9}$	$7,5 \cdot 10^{-3}$	0,19	0,20	$4,0 \cdot 10^{-8}$
154,3	$3,31 \cdot 10^{-6}$	0,018	0,19	0,21	$1,58 \cdot 10^{-5}$
160	$9,46 \cdot 10^{-5}$	0,035	0,20	0,24	$3,94 \cdot 10^{-4}$
190	$3,6 \cdot 10^{-3}$	0,11	0,24	0,35	$1,03 \cdot 10^{-2}$
300	$7,9 \cdot 10^{-3}$	0,73	0,38	1,11	$7,12 \cdot 10^{-3}$
152	0	0	$2,2 \cdot 10^{-4}$	$2,2 \cdot 10^{-4}$	0
152,4	$8,0 \cdot 10^{-9}$	$7,4 \cdot 10^{-3}$	$2,2 \cdot 10^{-4}$	$7,6 \cdot 10^{-3}$	$1,05 \cdot 10^{-6}$
154,3	$3,31 \cdot 10^{-6}$	0,018	$2,3 \cdot 10^{-4}$	0,018	$1,84 \cdot 10^{-4}$
160	$9,46 \cdot 10^{-5}$	0,035	$2,3 \cdot 10^{-4}$	0,035	$2,70 \cdot 10^{-3}$
190	$3,6 \cdot 10^{-3}$	0,11	$2,8 \cdot 10^{-4}$	0,11	$3,27 \cdot 10^{-2}$
300	$7,9 \cdot 10^{-3}$	0,73	$4,3 \cdot 10^{-4}$	0,73	$1,08 \cdot 10^{-2}$
(n=3)					

A táblázat adatai szerint a folyamat csak kb. $m_H \sim 170$ GeV körül válik észlelhetővé, ez azonban a $H \rightarrow ZZ \rightarrow Zff\gamma$ folyamat küszöbén fölül van, így a kiértékelést csak az avval való összehasonlítás útján lehet elvégezni, erre a 7.5 részben térünk vissza.

Az infravörös divergenciával kapcsolatos megfontolásaink helyességét mutatja a 13. ábra. Kiszámítottuk a differenciális szélességet a $\Gamma_W \rightarrow 0$ helyettesítéssel is. Ekkor a hatáskeresztmetszet kis fotonenergiákra — ahogyan vártuk — lineárisan divergál. Az elágazási arányok kicsi voltán ez nem változtat, ugyanis az 1 GeV feletti tartományban a görbék csak kevésbé térnek el. A kis bomlási szélesség oka a fázistér kicsisége.

7.4. $H \rightarrow ZZ \rightarrow Zf^+f^- \gamma$

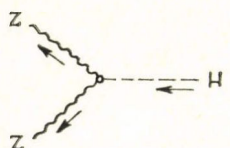
Ebben a részben kiszámítjuk a fotonspektrum alakulását a nehéz Higgs legelőnyösebb bomlásának, $H \rightarrow ZZ$ -nek a végeredmékeiben. A számítás technikájában tekintettel kell lenni arra, hogy a négyrészecskes végállapot nagyon elbonyolítja a számításokat, ezért a — gondolatmenet számítógép — orientált lesz, az egyes képletek helyett néhol az őket számító algoritmusokat közöljük. A végeredményt mindenképpen numerikus integrálással kaphatjuk, így viszont lényegesen kevesebb gépidő felhasználásával kapjuk az eredményt.

A fenti folyamattal párhuzamosan működik a $H \rightarrow WW\gamma$ folyamat is. Ez azt jelenti, hogy a csatolási állandók hasonlósága miatt az $f\bar{f}\gamma$ fázistérnek azon a részén, ahol $H \rightarrow Zf\bar{f}\gamma$ kicsi, $H \rightarrow WW\gamma$ dominál, így számításunknak ott van értelme, ahol a Z propagátor tömeghéjra kerül. A folyamat tehát úgy tekinthető, hogy a $H \rightarrow ZZ$ folyamat bomlási szélességét megszorozzuk a $Z \rightarrow f\bar{f}\gamma$ bomlási elágazási aránnyal. Ekkor külön kell figyelembe vennünk a longitudinális és a transzverzális polarizációjú Z bozonokat:

$$d\Gamma_{H \rightarrow Zf\bar{f}\gamma} = 2\Gamma(H \rightarrow Z_l Z_l) \cdot \frac{d\Gamma(Z_l \rightarrow f\bar{f}\gamma)}{\Gamma_z^{\text{tot}}} + 2\Gamma(H \rightarrow Z_t Z_t) \cdot \frac{d\Gamma(Z_t \rightarrow f\bar{f}\gamma)}{\Gamma_z^{\text{tot}}} + \Gamma(H \rightarrow Z_l Z_l) \cdot \text{valami.} \quad (7.24)$$

Ebben a kifejezésben az elágazási arányokat abból a koordináta-rendszerből kell kiszámítani, ahol Z áll (a továbbiakban K' rendszer), H szélességét pedig abból a rendszerből, ahol H áll (a továbbiakban K rendszer). Ez a tárgyalásmód ekvivalens azzal, amikor a Z propagátor helyébe megfelelően normált Dirac-deltát írunk be.

Kiszámítjuk a H bomlási szélességét. Ezt a



$$g_{HZZ} \cdot Z^\lambda Z_\lambda \quad g_{HZZ} = \frac{4\pi\alpha m_z^2}{4\sin^2\theta_w \cos^2\theta_w}$$

Feynman-gráf írja le. Ebből a totális szélesség

$$\int d\Gamma = \frac{g_{HZZ}^2}{32\pi m_z} \cdot \sqrt{1 - \frac{4m_z^2}{m_H^2}} |\epsilon_1^\lambda \cdot \epsilon_2^\lambda|^2, \quad (7.25)$$

ahol $\epsilon_{1,2}$ a Z polarizációs vektora. Értékét behelyettesítve, a két transzverzális polarizációra összegezve

$$\Gamma_{H \rightarrow Z_l Z_l} = \frac{\alpha m_z^2}{16\sin^2\theta_w \cos^2\theta_w \cdot m_H} \cdot \sqrt{1 - \frac{4m_z^2}{m_H^2}} \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{m_H^2}{2m_z^2} - 1 \right),$$

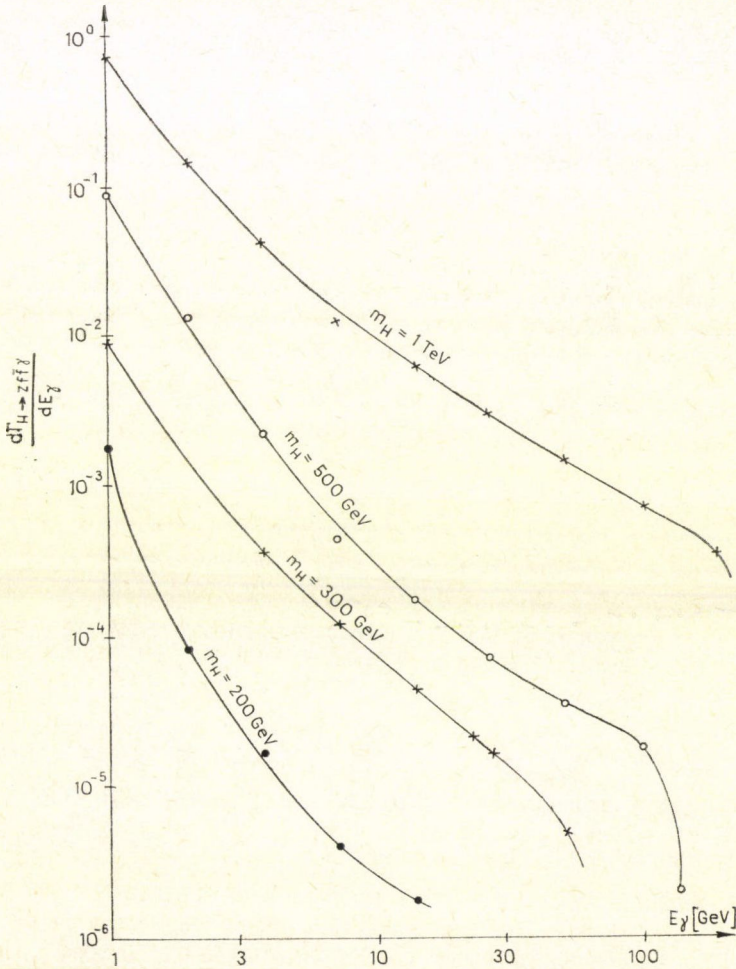
$$\Gamma_{H \rightarrow Z_t Z_t} = \frac{\alpha m_z^2}{16\sin^2\theta_w \cos^2\theta_w \cdot m_H} \cdot \sqrt{1 - \frac{4m_z^2}{m_H^2}}, \quad \Gamma_{H \rightarrow Z_l Z_t} = 0. \quad (7.26)$$

Ennek megfelelően (7.24) utolsó tagja eltűnik.

A Z elágazási arány számítása hosszú levezetést igényel, melyet itt elhanyagolunk. Az eredményt numerikusan integráltuk, és az eredményt ábrázoltattuk. A program úgy volt elkészítve, hogy jelezze, melyik fermion járuléka maximális az adott foton-energián. Végeredményben mindig az elektronjárulék volt nagyobb, ami megegyezett várakozásunkkal: e folyamatban a fermion nem csatolódik Higgshez, így a járulék nagyságát kis energián a propagátor kicsisége ($\Gamma_e=0$) szabja meg.

Az infravörös divergencia kis (1 GeV alatti) tartományon megjelenik. A sorfejtési állandó

$$4\pi\alpha \ln \frac{E_f}{E}.$$



14. ábra. A $H \rightarrow 22 \rightarrow 2f\tilde{f}r$ folyamat fotonspektruma

Maximális értéke 1 GeV fotonenergia esetén 0,35, ezért ide helyeztük a levágást. A fermionokat is a 2.1 táblázat szerint használtuk fel. A t kvark kihagyása esetén kb. 5 %-nyi eltérést tapasztaltunk csak, ezért azt itt nem szerepeltetjük külön.

A kapott eredményeket az 5. táblázat tartalmazza. Amint ott láthatjuk, a WW és ZZ csatorna parciális szélessége lényegében minden m_H -re azonos, de 300 GeV-től a $Zff\gamma$ dominál $WW\gamma$ felett.

A foton spektrumot a 14. ábrán láthatjuk. A spektrumok nagyenergiás végén történő levágás a fázistér összeszűkülésével kapcsolatos. A görbék lefutása átlagosan $E^{-1.5}$ -nél történik, ami azt jelenti, hogy főleg kis energiájú fotonok keletkeznek.

5. TÁBLÁZAT

m_H	$\Gamma_{(H \rightarrow WW)}$	$\Gamma_{(H \rightarrow f\bar{f})}$	$\Gamma_{(H \rightarrow ZZ)}$	$\Gamma_{(H \rightarrow Zf\bar{f}\gamma)}$	$BR \left(\frac{H \rightarrow Zf\bar{f}\gamma}{H \rightarrow X} \right)$
200	0,14	0,25	0,11	$1,91 \cdot 10^{-3}$	$3,82 \cdot 10^{-3}$
300	0,73	0,38	0,70	0,014	$7,73 \cdot 10^{-3}$
500	4,29	0,63	4,43	0,129	$1,38 \cdot 10^{-2}$
1000	38,1	1,27	40,56	1,500	$1,88 \cdot 10^{-2}$

(Minden mértékegység GeV.)

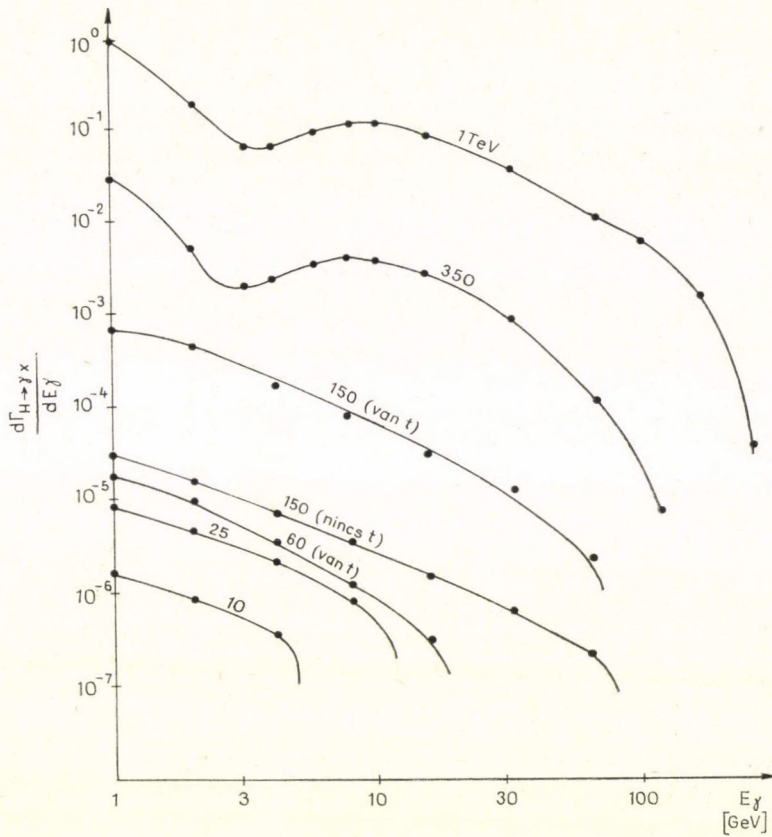
Az e fejezetbeli eredményeket nehéz fermion felfedezése viszonylag kevésbé befolyásolja. A $Z \rightarrow f\bar{f}\gamma$ bomlásban ezek kis szerepet játszhatnak a kisebb fázistérük miatt. Egyetlen jelentős hatásuk lehet, hogy 100 GeV feletti tömeg esetén annyira megnövelhetik a totális H bomlási szélességet, hogy az elágazási arány lényegesen lecsökken. Mindenesetre 300 GeV felett ez a vezető folyamat, azonban nehéz fermion a $H \rightarrow f\bar{f}\gamma$ bomlás valószínűségét is megnövelheti.

7.5. Foton spektrum $H \rightarrow X\gamma$

A 7.2—7.4 részekben tárgyalt folyamatok eredményeinek egyesítésével meghatároztuk a fix Higgs-tömeg melletti foton spektrumot, összegezve az összes lehetséges, a foton melletti fellépő végállapotra. A foton spektrumot az egyes folyamatokat számító szubrutinok felhasználásával végeztük el, az eredmény a 15. ábrán látható.

A $H \rightarrow f\bar{f}\gamma$, $H \rightarrow WW\gamma$ és $H \rightarrow Zf\bar{f}\gamma$ folyamatok mellett még figyelembe vettük a $H \rightarrow WW \rightarrow Wf\bar{f}\gamma$ folyamatot is. Ennek számítása a $H \rightarrow Zf\bar{f}\gamma$ analógiájára történik, csak a csatolási állandók és tömegek értékeit (a program input adatai) kellett megváltoztatni. E folyamat a teljes fizikai tartományon a $H \rightarrow ZZ \rightarrow Zf\bar{f}\gamma$, ill. $H \rightarrow f\bar{f}\gamma$ szélességének 30 %-a alatt maradt, így e folyamat görbéinek közlését nem tartottuk szükségesnek.

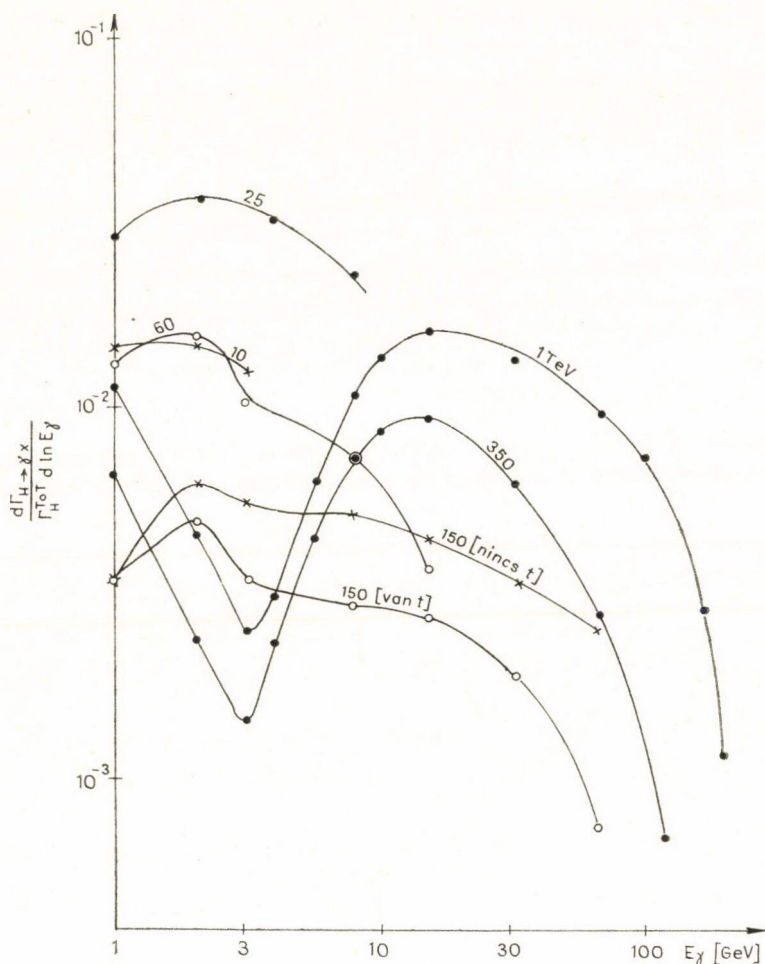
A foton spektrumban két elkülönülő tartományt fedezünk fel. Az $m_H \rightarrow 200$ GeV alatti tartományban $H \rightarrow f\bar{f}\gamma$ dominál, itt a spektrum egyenletesen csökkenő. Az $m_H > 200$ GeV tartományban 3 GeV alatt $H \rightarrow Zf\bar{f}\gamma$ dominál, 3 GeV felett pedig $H \rightarrow WW\gamma$. Ez 3 GeV körül lokális minimumot eredményez.



15. ábra. A $H \rightarrow \gamma X$ bomlás fotonspektruma. (A görbékre írt értékek m_H -t jelentik GeV-ban)

6. TÁBLÁZAT

m_H [GeV]	$\Gamma_{\text{tot}}(H)$	$\Gamma_{H \rightarrow \gamma X}$	$\frac{BR(H \rightarrow \gamma X)}{E_\gamma > 1 \text{ GeV}}$
10	$1,18 \cdot 10^{-4}$	$2,48 \cdot 10^{-7}$	0,21 %
25	$2,65 \cdot 10^{-4}$	$6,63 \cdot 10^{-6}$	2,5 %
60	$1,29 \cdot 10^{-3}$	$3,61 \cdot 10^{-5}$	2,8 %
150 nincs t	$5,27 \cdot 10^{-3}$	$1,00 \cdot 10^{-4}$	1,9 %
150 van t	0,190	$2,47 \cdot 10^{-3}$	1,3 %
350	4,15	0,133	3,2 %
1000	80	6,24	7,8 %



16. ábra. A $H \rightarrow \gamma\gamma$ bomlás energiaspektruma H teljes szélességéhez viszonyítva. (A görbére írt értékek m_H -t jelentik GeV-ban)

A görbék futása általában meglehetősen lapos, és a fizikai tartomány szélein hirtelen — a fázistér „elfogyása” miatt — levágnak.

A görbék különösen jól értékelhetők, ha egyrészt a Higgs teljes szélességéhez viszonyítjuk őket, másrészt az $\ln E$ szerinti eloszlást vizsgáljuk (16. ábra). Ekkor ugyanis az egyes E tartományoknak a teljes bomlási szélességbe adott járuléka a logaritmikus grafikonon a görbe alatti területtel lesz arányos. Ezen a grafikonon a 3 GeV körüli minimum még kifejezettebbé válik, a görbék általában egy nagyságrendnél kevesebbet változnak. A fizikai tartományok végén a lefutó görbe részeket az áttekinthetőség kedvéért elhagytuk.

A görbék integráljai a $BR = \frac{\Gamma_{H \rightarrow \gamma X}}{\Gamma_{\text{tot}}(H)}$ elágazási arányt adják. Ezt a 6. táblázatban tüntettük fel. A táblázat adataiból látható, hogy a fotonkeltéses folyamatokat a Higgs-bomlásban a minden töltött részecske keltést kísérő lágy foton tartományon túl az 1 GeV feletti tartományban is figyelembe kell venni. A 200 GeV feletti szupernehéz Higgs esetén a 3 GeV körüli minimum jellegzetes.

7.6. Kontakt csatolás

Amint azt a 7.1 részben mondtuk, megvizsgáljuk a $H \rightarrow WH^+\gamma$ és $H^+ \rightarrow WH\gamma$ folyamatokban a kontakt csatolások jelenlétét. A két dublettes modellben éppen a három semleges és az egy töltött Higgs tömegén kívül még két paraméter szabja meg a Higgs szektor szerkezetét. Az ellenőrzéshez ezért nagyszámú folyamat megvizsgálása szükséges. Különösen jellegzetesek a $H^+HW\gamma$ kontakt csatolások, melyeknek fellépése éppen a dublettszerkezetet bizonyíthatja.

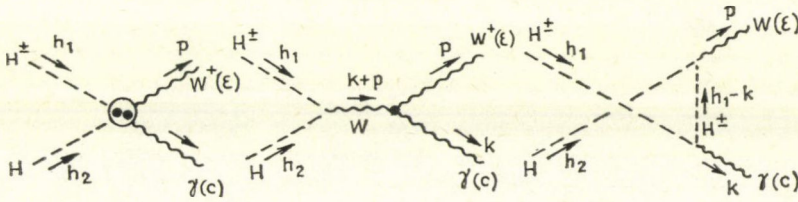
Az említett folyamat fellépése kinematikailag csak akkor lehetséges, ha valamelyik Higgs tömege nagyobb a másik és a W tömeg összegénél.

A számítások egyszerűsítése végett a 6 elképzelhető folyamatra egyszerre végzünk el a számítást, és H -val jelöljük a megfelelő semleges Higgs részecskét:

$$H = (H^0 | \Phi^0 | h^0). \quad (7.52)$$

Ezenkívül H és H^+ impulzusát egyaránt befelé irányítjuk, M jelöli a bemenő, m_h a kijövő Higgs-részecske tömegét. A $j=1$ eset a $H^\pm \rightarrow W^\pm H\gamma$, a $j=2$ a $H \rightarrow W^\pm H^\mp \gamma$ -t jelenti.

A fenti folyamatokban a következő Feynman-gráfokat kell figyelembe venni:



Itt tehát h_j a befele menő, és $-h_j$ a kifele menő impulzus, másrészt a H és W töltésének felcserélése nem változtat a hatáskeresztmetszeten, így a definitség kedvéért mindig W^+ keltésről fogunk beszélni.

A gráfokban szereplő vertexek a következők:

$$-i \frac{g}{2} e \cdot 1 \cdot g^{\lambda\mu}$$

$$\frac{g}{2} \cdot 1 \cdot (w - 2h_2)^\lambda$$

$$\begin{array}{cc}
 \begin{array}{c} \gamma^\lambda \\ \vdots \\ H^+ \text{---} h_1 \text{---} \text{---} H^+ \\ -2ie \cdot h_1^2 \end{array} &
 \begin{array}{c} \xi \\ \vdots \\ W^\nu \text{---} \gamma(k) \text{---} e \\ -ie \cdot [(e\varepsilon) \cdot (k-p)_\nu - (k\varepsilon)e_\nu + 2(pe)\varepsilon_\nu] \end{array}
 \end{array}$$

ahol a $WW\gamma$ vertexben γ és W^+ -t már megszoroztuk a megfelelő e és ε polarizációs vektorokkal, és bevezettük a

$$\mathbf{l} = (1|\sin^2(\alpha+\beta)|\cos^2(\alpha+\beta)) \quad (7.53)$$

jelölést. Ekkor az S -mátrixelemre a következő kifejezést kapjuk:

$$\begin{aligned}
 \mathfrak{M} = & ie \frac{g}{2} \mathbf{l} \left[(e\varepsilon)\alpha - \frac{4(h_1e)(h_2\varepsilon)}{(h_1-k)^2 - (m_{H^+} - i\Gamma_{H^+})^2} - \right. \\
 & \left. - \frac{(h_1-h_2)^\mu - \frac{m_{H^+}^2 - m_H^2}{m_w^2} (h_1+h_2)^\mu}{(k+p)^2 - (m_w - i\Gamma_w)^2} \cdot [(e\varepsilon)(k_\mu - p_\mu) - 2(k\varepsilon)e_\mu + 2(pe)\varepsilon_\mu] \right]. \quad (7.54)
 \end{aligned}$$

A függelékben adottak szerint felírva a két lényeges, E_k és E_p változókkal a differenciális hatáskeresztmetszetet kapjuk:

$$\begin{aligned}
 \frac{d\Gamma_{H^+ \rightarrow W^+ H_{m_h} \gamma}}{dE_k dE_p} = & \frac{e^2 g^2 [1|\sin^2(\alpha+\beta)|\cos^2(\alpha+\beta)]}{32 \cdot (2\pi)^3 \cdot M} \times \\
 & \times \left\{ \left| \alpha - \frac{(m_{H^+} - m_H)^2 + (-1)^j \cdot (m_w^2 + 2ME_k + 2ME_p)}{2M(E_k + E_p) - M^2 + m_h^2 - (m_w - i\Gamma_w)^2} \right|^2 \times \right. \\
 & \times \left[1 + \frac{M^2 + m_w^2 - m_h^2 - 2ME_p - 2ME_k + 2E_p E_k}{4E_k^2 \cdot (E_p^2 - m_w^2)} \right] + \frac{E_p^2}{m_w^2 \cdot (E_p^2 - m_w^2)} \times \\
 & \times \left[(E_p^2 - m_w^2) - \frac{(M^2 + m_w^2 - m_h^2 - 2ME_p - 2ME_k + 2E_p E_k)^2}{4E_k^2} \right] \times \\
 & \times \left| \alpha + 4\delta_{j2} \cdot \frac{E_p^2 - m_w^2}{E_p} \cdot \frac{M}{2E_p M - M^2 - m_w^2 + (m_{H^+} - i\Gamma_{H^+})^2} - \right. \\
 & \left. \left. - \frac{(m_{H^+}^2 - m_H^2) + (-1)^j \cdot \left(m_w^2 + 2ME_k - 2ME_p + 4M \cdot \frac{E_p^2 - m_w^2}{E_p} \right)}{2ME_p + 2ME_k - M^2 + m_h^2 - (m_w - i\Gamma_w)^2} \right|^2 \right\}. \quad (7.55)
 \end{aligned}$$

Itt a kontakt tag járulékának követése végett, annak járuléka elé egy $\alpha (=1)$ faktort helyeztünk. A fázistér

$$0 \leq E_k \leq \frac{M^2 - (m_w + m_h)^2}{2M}, \quad m_w \leq E_p \leq \frac{M^2 + m_w^2 - m_h^2}{2M}$$

és

$$E_p \in \frac{(M - E_k) \cdot \left(\frac{M^2 + m_w^2 - m_h^2}{2} - ME_k \right)}{M \cdot (M - 2E_k)} \pm$$

$$\pm \frac{E_k \cdot \sqrt{\left(\frac{M^2 + m_w^2 - m_h^2}{2} - ME_k \right)^2 - m_w^2 \cdot M \cdot (M - 2E_k)}}{M \cdot (M - 2E_k)}. \quad (7.56)$$

A (7.55–56) képleteknek megfelelően az MTA CDC 3300 gépével kirajzoltattuk a fizikai tartományt. A bemenő Higgs tömegének 200 GeV-ot választottunk, a kifutónak 10 GeV-ot. Az ábrázolt számok a hatáskeresztmetszetet mutatják a 17–18. ábrákon, ahol a c konstans:

$$C = -10 \lg \frac{e^2 g^2}{32 \cdot (2\pi)^3 \cdot M}. \quad (7.57)$$

A számolás $H = H^0$ -ra vonatkozik, a többire a $\sin^2(\alpha + \beta)$, ill. $\cos^2(\alpha + \beta)$ faktorokkal szorozni kell. A 19–20. ábrák a kontakt tag járulékát mutatják. Amint látjuk,

17. ábra. A $H \rightarrow W^+ H^- \gamma$ folyamat parciális szélessége

$$10 \lg \frac{d\Gamma}{dE_k \cdot dE_p} + C$$

18. ábra. A $H^+ \rightarrow W^+ H \gamma$ folyamat parciális szélessége

$$10 \lg \frac{d\Gamma}{dE_k \cdot dE_p} + C$$

19. ábra. A kontakt tag járuléka $H \rightarrow H^+ W^+ \gamma$ -ba

$$-10 \lg \left| \frac{d\Gamma(\alpha = 1) - d\Gamma(\alpha = 0)}{d\Gamma(\alpha = 1)} \right|$$

20. ábra. A kontakt tag járuléka $H^+ \rightarrow H W^+ \gamma$ -ba

$$-10 \lg \left| \frac{d\Gamma(\alpha = 1) - d\Gamma(\alpha = 0)}{d\Gamma(\alpha = 1)} \right|$$

a kis foton energiás tartományon kívül a kontakt tagnak lehet elég nagy, 10–70% járuléka. Ez azt jelenti, hogy a kísérletet a megfelelő kinematikai tartományok kizárásával kell elvégezni, erre az esetre vonatkozólag megvizsgáltuk a folyamat teljes szélességét $E_k < 1$ GeV levágással úgy, hogy az integrálásból kizártuk azokat a tartományokat, amelyekben a kontakt tag járuléka túl kicsi. Az eredményt a 7. táblázat mutatja. Látjuk, hogy a folyamat hatáskeresztmetszetének valamelyes csökkenése árán jelentős effektushoz juthatunk. Megjegyzendő, hogy a bomló Higgs szélességét 1 GeV-ra becsültük, tehát egy eleve kb. 15%-os elágazási arányú folyamatról van szó; így a kontakt tag járulékának kimutatása nem lehetetlen.

7. TÁBLÁZAT

J	$\left \frac{d\Gamma(\alpha=1) - d\Gamma(\alpha=0)}{d\Gamma(\alpha=1)} \right _{\min}$	$\Gamma_{H \rightarrow HW + \gamma} [\text{GeV}]$ $\alpha=1$	$\Gamma_{H \rightarrow HW + \gamma} [\text{GeV}]$ $\alpha=0$
1 0	0	$3,35 \cdot 10^{-2}$ $1,55 \cdot 10^{-1}$	$3,56 \cdot 10^{-2}$ $1,54 \cdot 10^{-1}$
1 0	0,1	$5,81 \cdot 10^{-3}$ $4,74 \cdot 10^{-3}$	$7,16 \cdot 10^{-3}$ $3,90 \cdot 10^{-3}$
1 0	0,3	$1,43 \cdot 10^{-3}$ $7,73 \cdot 10^{-4}$	$2,03 \cdot 10^{-3}$ $5,34 \cdot 10^{-4}$

8. ÖSSZEFOGLALÁS

Az elektromágneses és gyenge kölcsönhatások egyesített mértékelméleteinek igazolása és a még nyitott, Higgs szektor fixálása szempontjából elengedhetetlen Higgs részecske kimutatásával szélesen foglalkozik az irodalom. E dolgozatban azokkal a folyamatokkal kívántunk foglalkozni, amelyek még vizsgálatlanok maradtak.

A Higgs részecske keltése elvileg igen sokféleképpen volna lehetséges, azonban a csatolási állandók kicsisége miatt csak 2–3 reális jelölt folyamat létezik; ezeket a 6. fejezetben leírtuk. Mivel a 30 GeV feletti tartományról kísérleti eredmények nem állnak rendelkezésre, ezért feltételezzük — extrapolálva a 10–30 GeV közötti viselkedést —, hogy ott újabb elemi részecskék (fermionok) nem lépnek fel. Ezek esetleges felfedezése lényegesen megváltoztatja a képet.

A Higgs bomlás lényegesen több munkát ad: minden tömegtartományban lényegesen különböző eredményeket kapunk. A totális szélesség igen erősen függ a tömegtől: $m_H=1$ GeV-nál $\Gamma_H \sim 1$ eV, $m_H=200$ GeV-nál $\Gamma_H=1$ GeV és $m_H=1$ TeV-nál $\Gamma_H=1$ TeV! Ez utóbbi azt jelenti, hogy a szupernehéz Higgs részecske nem is fedezhető fel, jelenlétére csak a terek szerkezetéből lehet következtetni.

Dolgozatunkban először röviden összefoglaltuk a WS modell elvi alapjait és főbb állításait. A leírt variánsban a neutrinóknak kis tömege van. Részletesebben tekintettük át az egy- és kétdublettes Higgs szektor esetén fellépő csatolásokat (ezeket explicite felsoroljuk), és a Weinberg—Salam modell kísérleti státuszát. A nem fotonos bomlások közül kiszámítottuk a $H \rightarrow ZZ \rightarrow Zll$ bomlás parciális szélességét. Ebben azt találtuk, hogy a folyamat csak tömeghőj közelében levő Z -k esetén működik, és a totális $H \rightarrow Zll$ bomlási szélesség $m_H \sim 2m_z$ -nél eléri a 10 MeV értéket (ez kb. 3%-os elágazási arányt jelent ott).

Ezek után a Higgs bomlásaiban a fotonkeltést vizsgáltuk 1 GeV feletti fotonenergián. Úgy találtuk, hogy a számításba veendő folyamatok $H \rightarrow ff\gamma$, $H \rightarrow WW\gamma$, $H \rightarrow ZZ \rightarrow Zff\gamma$.

A $H \rightarrow ff\gamma$ folyamat eléggé érzékeny a legnehezebb kvark tömegére. Ha a t (25 GeV) kvark létezik, akkor e folyamatot $H \rightarrow WW\gamma$ csak $m_H=200$ GeV körül éri utol. Az összes fermionok közül a legnehezebbek adják a nagyobb járulékot, a teljes bomlási szélességnek 1–20%-át.

A $H \rightarrow WW\gamma$ csak kb. 200 GeV feletti m_H -nél észlelhető, ahol a teljes szélességnek hasonló százalékarányát képviseli. Ekkor viszont W nagy szélessége miatt 2 GeV alatt még mindig $H \rightarrow ff\gamma$ dominál, ami az egyesített fotonspektrumban érdekes szignaturát produkál: egy 3 GeV körüli minimumot.

Még nagyobb m_H -nál $H \rightarrow ZZ \rightarrow Zff\gamma$ lesz a domináns, és számításaink szerint túlszárnyalja $H \rightarrow WW \rightarrow Wff\gamma$ -t.

E folyamatok vizsgálatában mindenütt az 1 GeV feletti fotonenergiát vettük csak figyelembe. A kisebb energiákon a foton jelenléte nem befolyásolja a reakció kinematikáját, így a lágy foton sugárzás a végállapotból egyértelműen következik. Azt találtuk, hogy e folyamatokban a fotonspektrumok $\ln E$ -ben nagyjából egyenletesen oszlanak el, tehát nem csak kis energiájú fotonokat érdemes keresni.

A kétdublettes modellre lényegében — néhány ismeretlen $\sin/\cos(\alpha \pm \gamma)$ faktorból eltekintve — azonos eredmények adódnak. Megvizsgáltuk a $H \rightarrow H^+HW^- \gamma$, ill. $H^+ \rightarrow HW^+ \gamma$ folyamatokban a 4 részecske kontakt csatolás észlelhetőségét, és úgy találtuk, hogy mint a folyamat, mint bizonyos

kinematikai tartományban a kontakt tag, ha nehézségek árán is, kimutatható. E kontakt tag specifikus a két dublettes modellben és lehetőséget ad arra, hogy erősségének mérésével még a második semleges Higgs felfedezése előtt döntsünk a két dublettes, és a CP sértés bevezetéséhez szükséges 3 dublettes Higgs modell között.

A függelékben megadjuk a háromrészecskes végállapot fizikai tartományának képleteit.

9. FÜGGELÉK

9.1. A jelölésrendszer

A dolgozatban használt jelölésrendszer kompatibilis a Bjorken—Drell-féle jelölésrendszerrel.

A metrikus tenzor és a Dirac-mátrixok

$$g^{\lambda\mu} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} \quad \gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & -1 \\ & & & -1 \end{pmatrix} \quad \gamma^j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ -\sigma_j & 0 \end{pmatrix}$$

$$\gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

a használt mértékegységekre $\hbar = c = 1$.

Ennek megfelelően $1\text{eV} = (6,58 \cdot 10^{-16} \text{ sec})^{-1}$.


9.2. Gráfszabályok

A bomlási hatáskeresztmetszet a bomló részecske tömegközépponti rendszerében

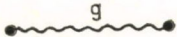
$$d\Gamma_{M \rightarrow p_j} = \frac{1}{2M} \frac{d^3 p_1}{2E_1(2\pi)^3} \cdots \frac{d^3 p_f}{2E_f(2\pi)^3} \cdot (2\pi)^4 \delta(p_1 + \dots + p_f - P_M) \cdot S \cdot |\mathfrak{M}|^2,$$

ahol az S faktor minden azonos részecske n -es esetén $1/n!$, az \mathfrak{M} korrigált mátrix-elem Lorentz-skalár — tehát bármely rendszerben számítható —, és hozzá a gráfok elemei a következő járulékokat adják:

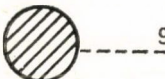
	$\bar{v}(p) \cdot \sqrt{2m_p}$ $\bar{u}(q) \cdot \sqrt{2m_q}$	(fermion)
	$v(p) \cdot \sqrt{2m_p}$ $u(q) \cdot \sqrt{2m_q}$	
	$\varepsilon_\lambda(p)$	(vektorrészecske)



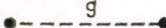
$$\frac{i(p+m)}{p^2(m_p-i\Gamma_p)^2} \quad (\text{fermion})$$



$$-i \frac{g_{\mu\nu}}{q^2+i2} \quad (\text{foton}) \qquad -i \frac{g_{\mu\nu} - \frac{q_\mu q_\nu}{M_v^2}}{q^2 - (M_v - i\Gamma_v)^2} \quad (\text{vektor-bozon})$$

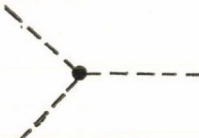


$$1 \quad (\text{skalár részec})$$




$$\frac{i}{q^2 + (m_q - i\Gamma_q)^2}$$

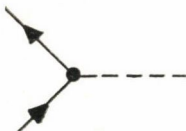
A minimális Weinberg—Salam-modell szellemeket tartalmazó vertexei a következők:




$$-\frac{m_H^2}{v} H G \bar{G} - \frac{m_H^2}{2v} H \cdot h^2$$



$$-\frac{m_H^2}{2v^2} H^2 G \bar{G} - \frac{m_H^2}{2v^2} (G \bar{G})^2 - \frac{m_H^2}{8v} h^4 -$$




$$-\frac{m_H^2}{2v^2} h^2 G \bar{G} - \frac{m_H^2}{8v^2} H^4 - \frac{m_H^2}{4v^2} h^2 H^2$$




$$\frac{\sqrt{2}m_f^t}{v} \left(\bar{G} \tilde{F}_b \frac{1-\gamma^5}{2} F_t + \text{h.c.} \right) - \frac{\sqrt{2}m_f^b}{v} \left(G \tilde{F}_t \frac{1-\gamma^5}{2} F_b + \text{h.c.} \right)$$

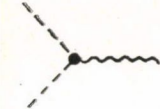
$$\sum_{j=t,b} (\pm i) \frac{m_f^j}{v} \tilde{F}_j \gamma^5 F_j h \quad \pm = \begin{cases} + (b) \\ - (t) \end{cases}$$




$$G: -em_w A^\lambda (G\bar{W}_\lambda + \bar{G}W_\lambda) - g' \sin \theta_w m_w Z^\lambda (\bar{W}_\lambda G + W_\lambda \bar{G})$$



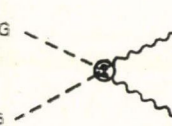
$$h: \frac{g}{2} (h\bar{W}^\lambda \partial_\lambda G + W^\lambda \partial_\lambda \bar{G}) - (\bar{W}^\lambda G + W^\lambda \bar{G}) \partial_\lambda h$$



$$\frac{e_i}{\sin 2\theta_w} \cdot Z^\lambda (H\vec{\partial}_\lambda h) + i \frac{g \cos \theta_w - g' \sin \theta_w}{2} Z^\lambda (\bar{G}\vec{\partial}_\lambda G) - ie A^\lambda (\bar{G}\vec{\partial}_\lambda G)$$

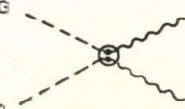


$$-\frac{eg}{2} HA_\lambda \cdot (\bar{G}W^\lambda + G\bar{W}^\lambda) - i \frac{gg' \sin \theta_w}{2} \cdot hZ_\lambda \cdot (\bar{G}W^\lambda + G\bar{W}^\lambda)$$

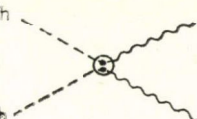


$$\left(\frac{g \cos \theta_w - g' \sin \theta_w}{2} \right)^2 \cdot \bar{G}G \cdot Z^\lambda Z_\lambda + 2e \cdot \frac{g \cos \theta_w - g' \sin \theta_w}{2} \cdot \bar{G}G \cdot A^\lambda Z_\lambda +$$

$$+ e^2 \cdot \bar{G}G \cdot A^\lambda A_\lambda + \frac{g^2}{2} \bar{G}G \cdot W^\lambda W_\lambda$$



$$-i \frac{eg}{2} hA_\lambda \cdot (\bar{G}W^\lambda + G\bar{W}^\lambda) - i \cdot \frac{gg' \sin \theta_w}{2} \cdot hZ_\lambda (\bar{G}W^\lambda + G\bar{W}^\lambda)$$



$$\frac{g^2}{2} h^2 \bar{W}^\lambda W_\lambda + \frac{(g \cos \theta_w + g' \sin \theta_w)^2}{8} \cdot h^2 Z^\lambda Z_\lambda.$$

A kétdublettes modell Higgs öncsatolás állandói a következők

$$\hat{g}_1 = \frac{2m_w}{g} [(\lambda_4 + 2\lambda_3) \sin(\beta + \alpha) + (\lambda_2 \cos \beta \cos \alpha + \lambda_1 \sin \beta \sin \alpha) \sin 2\beta]$$

$$\hat{g}_2 = \frac{2m_w}{g} [(\lambda_4 + 2\lambda_3) \sin(\beta - \alpha) + (-\lambda_2 \cos \beta \sin \alpha + \lambda_1 \sin \beta \cos \alpha) \sin 2\beta]$$

$$\hat{g}_3 = \frac{m_w}{g} [\lambda_5 + 2\lambda_3) \sin(\beta + \alpha) + (\lambda_2 \cos \beta \cos \alpha + \lambda_1 \sin \beta \sin \alpha) \sin 2\beta]$$

$$\hat{g}_4 = \frac{m_w}{g} [2\lambda_3 \sin(\beta + \alpha) + 3(\lambda_1 \cos \beta \cos \alpha + \lambda_2 \sin \beta \sin \alpha) \sin 2\alpha]$$

$$\hat{g}_5 = \frac{m_w}{g} [2\lambda_3 \sin(\beta - \alpha) - 3(-\lambda_1 \cos \beta \sin \alpha + \lambda_2 \sin \beta \cos \alpha) \sin 2\alpha]$$

$$\hat{g}_6 = \frac{2m_w}{g} [\lambda_3 \sin(\beta + \alpha) + (\lambda_1 \sin \beta \sin^3 \alpha + \lambda_2 \cos \beta \cos^3 \alpha)]$$

$$\hat{g}_7 = \frac{m_w}{g} [(\lambda_5 + 2\lambda_3) \cdot \sin(\beta - \alpha) + (-\lambda_2 \cos \beta \sin \alpha + \lambda_1 \sin \beta \cos \alpha)]$$

$$\hat{g}_8 = \frac{2m_w}{g} [\lambda_3 \cdot \sin(\beta - \alpha) + (\lambda_1 \cos \beta \cos^3 \alpha - \lambda_1 \sin \beta \sin^3 \alpha)]$$

illetve

$$g_1 = \frac{1}{2} \lambda_4 \sin 2(\beta + \alpha) - \sin 2\alpha (\lambda_2 \cos^2 \beta - \lambda_1 \sin^2 \beta)$$

$$g_2 = \frac{1}{2} \lambda_4 \sin^2(\beta + \alpha) + \lambda_3 + \lambda_2 \cos^2 \alpha \cos^2 \beta + \lambda_1 \sin^2 \alpha \sin^2 \beta$$

$$g_3 = g_5 = \lambda_3 + \lambda_2 \cos^4 \beta + \lambda_1 \sin^4 \beta$$

$$g_4 = \frac{1}{2} \lambda_4 \cos^2(\beta + \alpha) + \lambda_3 + \lambda_2 \sin^2 \alpha \cos^2 \beta + \lambda_1 \cos^2 \alpha \sin^2 \beta$$

$$g_5 = g_3$$

$$g_6 = \frac{1}{4} \lambda_5 \sin 2(\beta + \alpha) + \frac{1}{2} \sin 2\alpha (\lambda_1 \sin^2 \beta - \lambda_2 \cos^2 \beta)$$

$$g_7 = \frac{1}{2} \sin 2\alpha (\lambda_1 \cos^2 \alpha - \lambda_2 \sin^2 \alpha)$$

$$g_8 = \frac{1}{4} \lambda_6 \cdot \sin^2(\beta + \alpha) + \frac{1}{2} \lambda_3 + \frac{1}{2} \lambda_2 \cos^2 \beta \cos^2 \alpha + \frac{1}{2} \lambda_1 \sin^2 \beta \sin^2 \alpha$$

$$g_9 = \frac{1}{2} \lambda_3 + \frac{3}{8} (\lambda_1 + \lambda_2) \sin^2 2\alpha$$

$$g_{10} = \frac{1}{2} \sin 2\alpha (\lambda_1 \sin^2 \alpha - \lambda_2 \cos^2 \alpha)$$

$$g_{11} = \frac{1}{4} (\lambda_3 + \lambda_1 \sin^4 \alpha + \lambda_2 \cos^4 \alpha)$$

$$g_{12} = \frac{1}{4} \lambda_5 \cos^2(\alpha + \beta) + \frac{1}{2} \lambda_3 + \frac{1}{2} \lambda_2 \cos^2 \beta \sin^2 \alpha + \frac{1}{2} \lambda_1 \sin^2 \beta \cos^2 \alpha$$

$$g_{13} = \frac{1}{4} g_3$$

$$g_{14} = \frac{1}{4} (\lambda_3 + \lambda_1 \cos^4 \alpha + \lambda_2 \sin^4 \alpha).$$

9.3. A polarizációs vektorok

A dolgozatban a polarizációs vektorokra a következő összefüggéseket használjuk:

1. Fermionok

A külső fermionlábaknak megfelelő redukált

$$\sqrt{2m_f}v, \quad \sqrt{2m_f}u, \quad \sqrt{2m_f}\tilde{v}, \quad \sqrt{2m_f}\tilde{u}$$

polarizációs vektorok összegzésekor

$$\sum \sqrt{2m_f}^2 \cdot \tilde{v}_p v_p = \not{p} - m_f.$$

$$\sum \sqrt{2m_f}^2 \cdot \tilde{u}_p u_p = \not{p} + m_f.$$

Ezeknek a redukált polarizációs vektoroknak a használatakor nem lép fel a nevezőben m fermiontömeg, s így az esetleges $m \rightarrow 0$ határátmenet könnyen elvégezhető.

2. Vektorbozonok

Abban a koordináta-rendszerben, ahol a vektorrészesecske impulzusa

$$p^\lambda = (E|0|0|p)$$

alakú, a longitudinális polarizáció

$$\varepsilon_l^\lambda = \left(\frac{p}{M} |0|0| \frac{E}{M} \right),$$

a két transzverzális polarizáció pedig

$$\varepsilon_t^\lambda = \begin{cases} (0|1|0|0) \\ (0|0|1|0). \end{cases}$$

Ezekre érvényes

$$p^\lambda \varepsilon_\lambda = 0, \quad p \varepsilon_\lambda = 0, \quad \varepsilon_j^\lambda \varepsilon_{j'\lambda} = \delta_{jj'}, \quad \tilde{\varepsilon}_j^\lambda = \varepsilon_j^\lambda,$$

és a polarizációra való összegzés

$$\sum \varepsilon_p^\lambda \varepsilon_p^\mu = -g^{\lambda\mu} + \frac{p^\lambda p^\mu}{M^2}.$$

3. A foton

Abban a koordináta-rendszerben, amelyikben a fotonimpulzus

$$k^\lambda = (E|0|0|E)$$

alakú, a használt transzverzális mértékben a polarizációs vektorok

$$e_j^\lambda = \begin{cases} (0|1|0|0) \\ (0|0|1|0). \end{cases}$$

Ezekre érvényes

$$k_\lambda e_j^\lambda = 0, \quad e_j^\lambda e_{j'\lambda} = -\delta_{jj'},$$

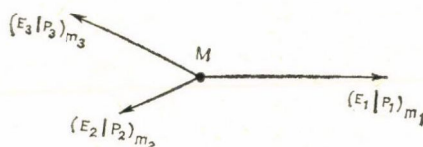
és a spinekre való összegzés esetén

$$\sum_j e_j^\lambda e_j^\mu = -g^{\lambda\mu} + \frac{k^\lambda n^\mu + k^\mu n^\lambda}{2E} - \frac{k^\lambda k^\mu}{E^2},$$

ahol $n=(1|0|0|0)$ egységvektor. E kifejezés utóbbi két tagja nem ad járulékot a $k^\lambda J_\lambda=0$ feltétel miatt, a számításainkat azonban mindkét módon elvégeztük (tehát k^λ -vel arányos tagokkal és azokat elhagyva, ellenőrzés céljából).

9.4. Háromrészecskés fázistér

Közljük a háromrészecskés fázistér nagyságát és a fizikai tartományt tömegközépponti rendszerben. Egy M invariáns össztömegű rendszer 3 db, E_i energiájú, m_i tömegű és p_i impulzusú részecskére bomlik:



Ekkor a fázistér nagysága

$$\frac{d^3 \mathbf{p}_1}{2E_1} \cdot \frac{d^3 \mathbf{p}_2}{2E_2} \cdot \frac{d^3 \mathbf{p}_3}{2E_3} \cdot (2\pi)^4 \cdot \delta^4(\text{impulzus}) = \frac{(2\pi)^4}{8} d\Omega_{p_1} \cdot d\varphi_{p_1 p_2},$$

ahol $d\Omega_{p_1}$ a p_1 impulzus térszögeleme, φ_{p_1, p_2} a p_2 impulzus helyzeté a p_1 -re merőleges síkban meghatározó Euler-szög. A fizikai tartomány az M , E_1 és E_2 mennyiségekre a

$$M > m_1 + m_2 + m_3$$

$$m_1 \leq E_1 \leq \frac{M^2 + m_1^2 - (m_2 + m_3)^2}{2M}$$

$$E_2^- \leq E_2 \leq E_2^+$$

$$E_2^\pm = \frac{(M - E_1) \cdot A \pm \sqrt{E_1^2 - m_1^2} \cdot \sqrt{A^2 - m_2^2 (M^2 + m_1^2 - 2M \cdot E_1)}}{M^2 - m_1^2 - 2ME_1},$$

ahol

$$A = \frac{M^2 + m_1^2 + m_2^2 - m_3^2}{2} - ME_1.$$

A térbeli $SO(3)$ elforgatás 3 paraméterén kívül E_1 és E_2 az összes impulzust meghatározza, ezek szorzataira a következő összefüggéseket kapjuk:

$$\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 = \frac{M^2 + m_1^2 + m_2^2 - m_3^2}{2} + E_1 E_2 - M(E_1 + E_2),$$

$$(p_1^\lambda p_{2\lambda}) = M(E_1 + E_2) - \frac{M^2 + m_1^2 + m_2^2 - m_3^2}{2},$$

$$(p_1^\lambda p_{3\lambda}) = -ME_2 + \frac{M^2 - m_1^2 + m_2^2 - m_3^2}{2},$$

$$(p_2^\lambda p_{3\lambda}) = -ME_1 + \frac{M^2 + m_1^2 - m_2^2 - m_3^2}{2}.$$

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Köszönetemet fejezem ki *Pócsik György* egyetemi tanárnak, akinek folytonos segítsége nélkül ez a dolgozat nem készülhetett volna el. Hasonlóképpen köszönet illeti *Ill Mártont*, az MTA Csillagászati Kutató Intézet osztályvezetőjét, akinek támogatása nagyban hozzájárult a dolgozat sikeres elkészítéséhez.

IRODALOM

- [1] *Yang CN, Mills R.*, Phys. Rev. Lett. 96, 191, 1954.
- [2] *Bogoljubov NN., Sirko DV.*, Vegyenyije v teoriiju kvantovannuh polej, Nauka, 1976, 169. o.
- [3] *Abers ES., Lee BW.*, Gauge Theories, Phys Rep 9, 1973.
- [4] *Lendvai E.*, Doktori disszertáció, Magyar Fiz. Folyóirat 26, 44, 1978.
- [5] *Goldstone, J.*, Nuovo Cim, 19, 15, 1961; Phys. Rev. Lett. 127, 965, 1962.
- Nambu Y.*, Phys. Rev. Lett. 4, 380, 1960.
- [6] *Higgs PW.*, Phys. Rev. Lett. 12, 132, 1964.
- Kibble TW.*, Phys. Rev. 145, 1156, 1966.
- [7] *T'Hooft G., Veltmann MT.*, Nucl. Phys. B44, 189, 1973.
- [8] *Vajnstejn AJ.*, Usp. Fiz. Nauk, 131, 541 1980.
- [9] *Bernabéu J., Pascual P.*, Electro-Weak Theory, GIFT, 1981.
- [10] *Branson JG.*, 1981 International Symposium On Lepton and Photon Interactions at High Energies, Bonn, August 1981
- [11] *Baltay, C.*, 19th International Conference on High Energy Physics Tokyo, ed. *Takeda*, p. 882.
- [12] *Reines F. et al.*, Phys. Rev. Lett. 37, 315, 1976.
- [13] *Nasert F. J. et al.*, Phys. Lett. B46, 121, 1973.
- [14] *Blietschan J. et al.*, Nucl. Phys. B114, 189, 1978.
- [15] *Armenise Netal*, Phys Lett. B86, 225, 1979.
- [16] *Berge J. P. et al.*, Phys Lett. B84, 357, 1979.
- [17] *Bartel W. et al.*, BESY 81—072, 1981.
- [18] *Hollebeek R.*, 1981 International Symposium on Lepton and Photon Interactions at High Energies, Bonn, August 1981.
- [19] *Seghal, L. M.*, Phys. Lett. B71, 99, 1977.
- [20] *Geweniger C.*, International Conference 1979, Bergen, Norway.
- [21] Illinois—Maryland-etc. Collaboration, International Conference on Neutrino Interaction Physics and Astrophysics 1981, Wailea, Miami, Hawaii.
- [22] *Kim J. E. et al.*, Rev. Mod. Phys. 53, 211, 1980.
- [23] *Leader, E., Predazzi E.*, An Introduction to Gauge Theories Can. Univ. Press. 1982.
- [24] *Barkov L. M., Zolotorev M. S.*, Phys. Lett. B85, 308, 1979.
- [25] *Baird P. E. G. et al.*, Phys. Rev. Lett. 39, 798, 1977.
- [26] *Bogdanov Y. V. et al.*, JETP. Lett. 31, 214, 1977.

- [27] *Lewis J. J. et al.*, Phys. Rev. Lett. 39, 795, 1977.
- [28] *Hollister et al.*, Phys. Rev. Lett. 46, 643, 1981.
- [29] *Bucksbaum et al.*, Phys. Rev. D24, 1134, 1981.
- [30] *Bucksbaum P. H. et al.*, Phys. Rev. Lett. 46, 640, 1981.
- [31] *Hüffel H., Pócsik G.*, ELTE Preprint UWThPh—80—20.
- [32] *Veltman M.*, Acta Phys. Pol. 64, June, 1977.
- [33] *Lendvai E., Pócsik G.*, ITP Rep. 403 Jul. 1981.
- [34] *Watson P. J. S., Sundaversan MK*, Can. J. Phys. 52, 2037, 1974.
- [35] *Sundaresan M. K., Watson PJS*, Phys. Rev. Lett. 29, 15, 1972.
- [36] *Kohler D. et al.*, Phys. Rev. Lett. 33, 1628, 1974.
- [37] *Barbieri R., Ericson TEO*, Phys. Lett. B57, 270, 1975.
- [38] *Coleman S., Weinberg E.*, Phys. Rev. D7, 1888, 1975.
- [39] *Linde AD*, Phys. Lett. 70B, 306, 1977.
- [40] *Linde AD*, Phys. Rev. D14, 3345, 1976.
- [41] *Ellis J. et al.*, Nucl. Phys. B106, 292, 1976.
- [42] *Ahijezzer A. I., Bereszyeckij V. B.*, Kvantovaja Elektrodinamika, Nauka 1981, 259 o.
- [43] *Yan T. M., Dvell S. P.*, Phys. Rev. Lett. 25, 316, 1970.
- [44] *Datta P., Bondyopadhyay D.*, J. Phys. G—NU 7, 845, 1981.
- [45] *Wilczek*, Phys. Rev. Lett. 39, 1304, 1977.
- [46] *Pócsik G., Torma T.*, Z. Physik C6, 1, 1980.
- [47] *Torma T.*, The partial width of the Higgs boson, ELTE preprint és Act. Phys. (nyomás alatt).
- [48] *Torma T.*, More on photon production in Higgs decay, ELTE preprint.
- [49] Phys. Lett. 126 B, 398, 1983.
- [50] Phys. Lett. 122 B, 103, 1983.

AZ ARTÉRIAFAL ANIZOTROP ROSTSZERKEZETÉNEK NEMLINEÁRIS MODELLJE

HUDETZ ANTAL ÉS MONOS EMIL

Semmelweis Orvostudományi Egyetem
Klinikai Kísérleti Kutató és II. sz. Élettani Intézet, Budapest

A rostokkal merevített elasztikus anyagok kontinuumelméletének felhasználásával az artériafal homogén, folytonos, kétdimenziós szerkezeti modelljét állítottuk fel. Célunk az érfal-szerkezet mechanikai csatoláserősségeit jellemző inkrementális Poisson-számok különböző deformációs állapotokban való kiszámítása volt. A hengeresen ortotrop, inkompresszibilis érfal szerkezeti modellje egy homogén, izotrop, inkompresszibilis, lineárisan elasztikus alapanyagból, és az ebbe ágyazott, helikális rosthálózatot alkotó nyújthatatlan rostokból (kollagén) áll. A deformálatlan állapotban laza rostok mérésel meghatározható eloszlásfüggvény szerint kapcsolódnak be a teherviselésbe, miközben a laza rostokat hordozó, szabadon deformálódó alapanyag alakváltozása és a rostokkal merevített fázis deformációja kölcsönhatás nélkül szuperponálódik.

A szerkezeti modell igazolására kutya carotis communis és iliaca artériákon in vitro, kvázi-statisztikus méréseket végeztünk. A mérési eredményekből meghatározott kollagén-eloszlásfüggvény felhasználásával, különböző kezdeti rostsűrűségek mellett 0–250 Hgmm intraluminális nyomásnak megfelelő tangenciális megnyúlás-tartományban kiértékeljük az inkrementális Poisson-számokat. Számítási eredményeinket összevetettük az ugyanezen artériákon végzett mérések adataiból, az érfal deformációs energiafüggvényének felhasználásával kiszámított Poisson-számokkal. Megállapítottuk, hogy a szerkezeti modell a tapasztalatnak megfelelően adja vissza a Poisson-számok változási irányait, és így kielégítően tükrözi az artériafal nemlineáris anizotrop elasztikus tulajdonságait.

BEVEZETÉS

A nagyartériák vérvezető és vérnyomáshullám-formáló funkcióját mind egészséges, mind kóros esetekben csak az erek mechanikai tulajdonságainak egzakt ismeretében tudjuk kvantitatíve értékelni. A mechanikai tulajdonságokat döntően az érfalat alkotó passzív struktúraelemek sajátosságai, architektúrája és a simaizomsejtek aktivitása szabja meg. A simaizom-kontrakció mechanikai tulajdonságokra gyakorolt hatását, valamint a passzív struktúraelemeknek a simaizom-kontrakció hatékonyságában játszott szerepét az utóbbi időben széles körben tanulmányoztuk (Hudetz és mtsai, 1979; Monos és mtsai 1977a, 1977b, 1978). Az erek szerkezeti felépítésének törvényszerűségeiről viszont ma még igen hiányos ismereteink vannak, kivéve az aorta szerkezetére vonatkozó néhány adatot (Jipp és Seifert, 1963; Wolinsky és Glagov 1964, 1967). Tudjuk, hogy a nagyartériák mechanikai szempontból legfontosabb alkotóelemei a mucopolysaccharid alapanyagba ágyazott elasztikus rostok és membránok, a köztük elhelyezkedő simaizom sejtek, valamint a mediális és adven-

* Érkezett: 1982. okt. 22.

** Az Eü. Min. 3.01 és 2.01 számú kutatási főirányaihoz kiemelt szintre elfogadott kutatási témában végzett kutatómunka alapján (1—07—0301—00—1/k).

ticiális kollagén rostok, ill. azok hálózatai. Ismeretlen azonban a struktúraelemek mechanikai kapcsolata, és kölcsönhatásuk az intraluminális nyomás, ill. a tengelyirányú nyújtóerő által létrehozott teher viselésében. Így nincs kellően alátámasztott elképzelésünk arra sem, hogy milyen szerkezeti változások okozzák az erek intraluminális nyomástól (és általában a deformációs állapottól) erősen függő elasztikus tulajdonságait. Éppen ezért ahhoz, hogy az érfal egy mechanikai szempontból reális modelljének szintézisét megvalósíthassuk, az aktív elemek fiziológiai működésének tanulmányozása mellett igen nagy jelentősége van olyan szerkezethű matematikai modellek felállításának, melyek a passzív struktúraelemek architektúrájának figyelembevételével az érfalrugalmasság nemlineáris és anizotrop jellegzetességeit a tapasztalatnak megfelelően tükrözik.

Jelen munkánkban kidolgozott érfalszerkezeti modellünk a nagyartériák morfológiájának kvalitatív adataira, és néhány kontinuummechanikai feltételezésre épül, és az artériák nemlineáris anizotrop tulajdonságait a passzív szerkezeti elemek konkrét szerkezeti elrendeződésével reprezentálja. Kérdésünk az volt, vajon modellezhető-e az artériák nemlineáris, anizotrop tulajdonságai egy lineáris, izotrop alanyra bontott, egyszerű rostszerkezet segítségével. Mint az alábbiakban ki fogjuk fejteni, az alapvető jellegzetességek valóban következnek a kollagén rostok helikális struktúrájából.

Az erek nemlineáris rugalmasságát először egyszerű, egydimenziós elasztin-kollagén modellel írtuk le, mely lehetőséget nyújt a kollagén rostok teherviselésében játszott szerepének jellemzésére, és a kollagén eloszlásfüggvényének meghatározására. A térbeli deformációs viselkedés leírására kétdimenziós szerkezeti modellt állítottunk fel, mely az intraluminális nyomástól és az axiális nyújtóerőtől függő mechanikai csatolásokra jellemző Poisson-számokat az érfal-kollagén hálózatos struktúrájával magyarázza. Szerkezeti modellünk kiértékelése kutya carotis communis és iliaca artériákon végzett, in vitro mérési adatok alapján történt. A korábban bevezetett exponenciális deformációs energia függvény alkalmazásával (*Hudetz és mtsai, 1975*) ugyanazon mérési adatokból közvetlenül is meghatároztuk a Poisson-számokat, és összehasonlítottuk a szerkezeti modellből számított állandókkal.

A NEMLINEÁRIS RUGALMASSÁG EGYDIMENZIÓS MODELLJE

Régóta ismeretes, hogy az artériák rugalmasságának és disztenzibilitásának magas intraluminális nyomásnál bekövetkező jelentős csökkenését a teherviselésbe bekapcsolódó igen merev kollagén rostok okozzák. *Burton* (1954), ill. *Roach és Burton* (1957) eredeti elképzelése szerint az ereket alkotó elasztikus és kollagén elemek mechanikailag egymással párhuzamosan vannak kapcsolva. (Lásd még: *Bader, 1963.*) Kis nyomásnál a kollagén rostok lazák, bennük feszültség nem keletkezik, és az érfal rugalmasságát döntően az elasztikus elemek határozzák meg. Növekvő nyomásnál mind több és több kollagén kerül kifeszített állapotba, és az ér rugalmasságát egyre inkább a kollagén determinálja. *Roach és Burton* (1957), továbbá *Goto és Kimoto* (1966) különböző emésztési eljárásokat alkalmaztak a szerkezeti elemek mechanikai szerepének elkülönítésére, és kvalitatíve igazolták a fenti elképzelést. *Middleman* (1972) egy matematikai modellt is kidolgozott az érfal rugalmassági modulusának kiszámítására, az elasztinnal párhuzamosan elrendezett kollagén rostok feltételezett eloszlásfüggvényének felhasználásával.

Az eddigi mérések szerint a kollagén rostok rugalmassági modulusa közel három nagyságrenddel nagyobb az elasztinénál (Bergel, 1960; Burton, 1954; Krafka, 1939). Nádasy (1978) számításai szerint az umbilikális artéria kollagén tartalmához képest elenyészően csekély számú, cm^2 -enként csak néhány kollagén elég lenne az érfal magas intraluminális nyomásnál mutatott rugalmas merevségének biztosításához, ha a kollagén rostok teljesen körbefognák az érfalat. Nem zárható ki az a lehetőség sem, hogy az elektronmikroszkópos képeken hullámos kötegeknek mutatózó kollagén rostok (Wolinsky és Glagov, 1964, 1967) olyan spirális, rugószerű formába rendeződnek, mely véges mértékben rugalmasan nyújtható a rostok teljes kiegyenesedéséig (Ling és Chow, 1977). Elképzelésünk szerint azonban a kollagén rostok az érfalban az elasztikus membránokkal részben párhuzamosan, részben sorba kapcsolódva helyezkednek el. A kollagén véletlenszerű eloszlásban az elasztinnak csak bizonyos hányadához csatlakozik párhuzamosan (1. ábra).

A rugalmassági nemlinearitás így onnan ered, hogy növekvő megnyúlásnál a fokozatosan kifeszülő merev kollagén rostok az elasztikus elem mind nagyobb hányadával kapcsolódva, csökkentik annak további nyújthatóságát, s így az érfal rugalmasságát.

Fenti megfontolásoknak megfelelően kialakított egydimenziós szerkezeti modellünk lényege a következő: Az érfal passzív mechanikai viselkedését az elasztin és a kollagén határozza meg, az alapállomány, és az egyéb szövetek módosító hatását belefoglaljuk az elasztin rugalmasságába. A kollagént praktikus nyújthatatlannak tekinthetjük. Ha egy adott belső nyomásnál a kollagén a teljes d értékerület x -ed részét fogja át ($0 \leq x \leq 1$), a további rugalmas megnyúlásban részt vevő elasztin hossza $(1-x)d$, melyet redukált kerületnek nevezünk (1. ábra). Ehhez hasonlóan definiáljuk a redukált deformáció fogalmát. Feltételezésünk értelmében a kollagén által átfogott elasztikus szövet hányada az aktuális megnyúlás értékétől függ, így megadott tangenciális deformáció esetén

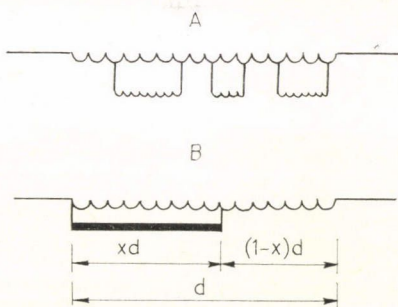
$$x_\theta = x_\theta(R/R_0),$$

vagy egyszerűen

$$x_\theta = x_\theta(R),$$

ahol R és R_0 az aktuális és a kezdeti közepes érsugarak. (A „ θ ” index jelzi, hogy az x tangenciális deformációtól való függését vizsgáljuk.) A természetes (logaritmus) deformáció mérték definíciója a tangenciális normál komponensre a következő:

$$\varepsilon_\theta = \ln \frac{R}{R_0} = \int_{R_0}^R \frac{dr}{r}.$$



1. ábra. Az érfal szerkezeti elemeinek feltételezett elrendeződése és reprezentációja az egydimenziós szerkezeti modellben. Az igen nagy rugalmassági modulusú kollagén rostok az érfal elasztikus szöveteihez véletlenszerű eloszlásban kapcsolódnak (A). A szerkezeti modellben nyújthatatlannak feltételezett rostok x részarányban korlátozzák a d kerületű érfal megnyúlását (B).

Így a redukált deformációt kézenfekvően úgy definiálhatjuk, mint

$$\varepsilon_{\theta}^{(r)} = \int_{R_0}^R \frac{dr}{r[1-x_{\theta}(r)]}.$$

A következőkben felállítjuk a hengeresen ortotrop, inkompresszibilis érfal nemlineáris elasztikus alapegyenletét, axiálisan izometrikus esetre. Mint már korábban megmutattuk (Hudetz, 1979) az említett feltételek mellett az alapegyenletek csak az egyes feszültségkomponensek különbségét határozzák meg. Pl. jelen esetben:

$$t_{\theta} - t_r = f(\varepsilon_{\theta})$$

ahol t_{θ} és t_r tangenciális és radiális (Cauchy-féle) normál falfeszültségek. Számos vizsgálat megerősítette, hogy az elasztin jó közelítéssel lineáris rugalmasságú (Burton, 1954; Goto és Kimoto, 1966; Roach és Burton, 1957; Azuma és Hasegawa, 1971). Mindezek alapján a redukált deformáció felhasználásával az érfal elasztikus alapegyenletét a következőképpen írhatjuk fel:

$$t_{\theta} - t_r = B_0 \varepsilon_{\theta}^{(r)},$$

vagyis

$$t_{\theta} - t_r = B_0 \int_{R_0}^R \frac{dr}{r[1-x_{\theta}(r)]}, \quad (1)$$

ahol B_0 az elasztikus szövet állandónak feltételezett rugalmassági modulusa. Az (1) alapegyenletünket $x_{\theta}(R)$ meghatározására fogjuk felhasználni. Az egyenletet átrendezve:

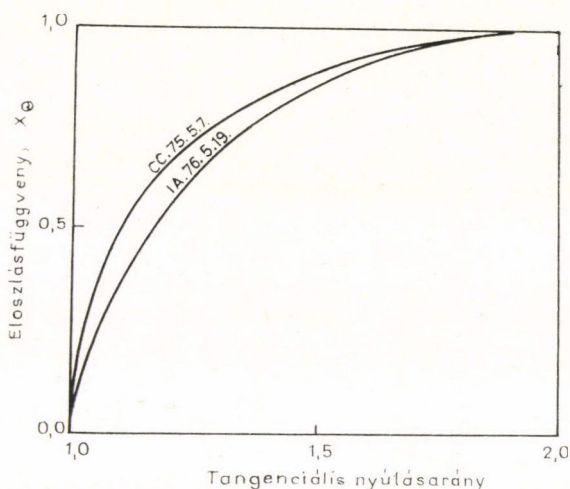
$$x_{\theta} = 1 - \frac{B_0}{B}, \quad (2)$$

ahol

$$B = R \frac{d}{dR} (t_{\theta} - t_r) \quad (3)$$

az érfal átlagos tangenciális-radiális inkrementális modulusa (Hudetz, 1977). B_0 értékére az irodalomban nem találtunk kielégítően pontos adatot. Ha feltételezzük, hogy zérus tangenciális megnyúlásnál nincs feszes kollagén rost, azaz $x_{\theta}(R_0)=0$, akkor az elasztikus elem modulusát a deformálatlan érfal modulusával azonosíthatjuk, azaz $R=R_0$ esetén $B_0=B(R_0)$. Így B több pontban való mérésével $x_{\theta}(R)$ meghatározható.

A 2. ábrán egy carotis communis artéria kollagéneloszlás-függvényét láthatjuk (a mérési és számítási módszereket lásd alább). Megállapíthatjuk, hogy a kollagén rostok legnagyobb része már egészen kis érsugárnál bekapcsolódik a teherviselésbe. Az eloszlásgörbe a vízszintes tengely felől konkáv, mint minden általunk vizsgált carotis és iliaca artéria esetében. Más típusú ereken az eloszlásfüggvény eltérő lehet. Hartung (1974) az érfal, mint „kétfázisú-anyag” egy fenomenologikus modelljét állította fel, melyben Wolinsky és Glagov (1964) aortán végzett mérési adatait felhasználva enyhén szigmoid alakú eloszlásfüggvényt kapott. Middleman (1972) elasztin-kollagén szerkezeti modelljében az eloszlásfüggvény per. def. szigmoid alakú, ez azonban nála nem is lehetett másképpen az alkotóelemek párhuzamos kapcsolása miatt.



2. ábra. A kollagének megfelelő nyújthatatlan rostok egydimenziós eloszlásfüggvénye a normalizált érsugár függvényében egy a. carotis communis és egy a. illiaca esetében. Mint látható, már igen kis $\lambda_\theta = 1,1$ körüli nyúlásaránynál feszes rostok határozzák az elasztikus alapállomány felének megnyúlását

A KÉTDIMENZIÓS SZERKEZETI MODELL

1. Alapfeltevések

Mindaddig nem foglalkoztunk a kollagén rostok térbeli orientációjával. *Wolinsky és Glagov* (1964) vizsgálatai szerint a mediális kollagén rostok a cirkumferenciális irányhoz közel álló, kis szögű helix alatt futnak, 100 Hgmm nyomás felett egyenletesen sűrű, homogén eloszlásban. Az elasztin és a kollagén rostok között nem mutatható ki mechanikai kapcsolat. A kollagén rostok másik, sokkal kevésbé szabályosan orientált adventiciális hálózata feltehetően csak extrém magas interaluminális nyomásnál játszik szerepet a teherviselésben. Normális viszonyok mellett a fő mechanikai funkciót tehát a mediális kollagén látja el (*Bergel*, 1961, *Roach és Burton*, 1957, *McDonald*, 1960).

Kérdés, vajon az érfal rugalmas anizotrópiája megmagyarázható-e pusztán a mediális kollagén rostok sajátos elrendeződésével. A lényegében e kérdés megválaszolására felállított kétdimenziós szerkezeti érfalmodellünk alapfeltevései a következők:

1. Az artéria homogén, egyenes, kör keresztmetszetű, vékony falú, hengeresen ortotrop elasztikus cső.
2. Az artéria két alapelemből áll: elasztikus alapanyagból, és a kollagének megfelelő rostok hálózatából.
3. Az alapanyag homogén, izotrop, lineáris rugalmasságú, és inkompresszibilis. (Később figyelembe fogunk venni anizotrop tulajdonságokat is.)

4. A rostok végtelenül vékonyak, nyújthatatlanok és hajlékonyak, azaz csak húzó-feszültség ébredhet bennük.
5. A rostok kezdetben (zérus nyomásnál) két egymást keresztező, az ér tengelyével azonos szöget bezáró családba rendeződve, helikálisan futnak.
6. A rosthálózat kétdimenziós, az ér egyetlen végtelenül vékony palástjában helyezkedik el.
7. A rostok eloszlása folytonos, azaz az érfal tetszőlegesen kis elemén keresztül megy egy rost.
8. A rostoknak általában csak egy része áll feszültség alatt, s ezek aránya a teljes mennyiséghez viszonyítva csak deformációtól függ.
9. A laza rostok és az alapanyag közt kölcsönhatás nincs, a feszes rostok az alapanyaghoz tapadnak (a kollagén blokkoló hatása).
10. Az alapanyag szabad és rostokkal blokkolt részének (két „fázisának”) deformációja makroszkopikusan szuperponálódik.

A fenti feltételezések tehát az érfal egy olyan makroszkopikusan homogén, nemlineáris, anizotrop modelljét adják, melynek folytonos eloszlású alkotóelemei az érfal mindenkor deformációs állapotától függő parciális sűrűségüknek megfelelően (mint egy folyadék-elegy komponensei), kölcsönhatás nélkül járulnak hozzá az érfal makroszkopikus mechanikai viselkedéséhez. A valóságban a mikroszkopikus kölcsönhatások eredményeként lokális nyíródeformációk keletkeznek, melyek azonban makroszkopikusan kiátlagolódnak. Ez biztosítja, hogy az érfal hengeresen ortotropnak tekinthető. A feltételezett rostozat struktúrája bár kétdimenziós, az inkompresszibilitás miatt háromdimenziós leírást tesz lehetővé. E modellnek megfelelő típusú ún. „fibre-reinforced” anyagok általános kontinuummechanikáját *Spencer* (1972) dolgozta ki. Mielőtt rátérnénk modellünk konkrét ismertetésére, célszerű megismernednünk néhány alapfogalommal a rostokkal merevített anyagok mechanikájából.

2. Kinematika és feszültségek rostos anyagban

Kinematikai kényszerek esetén a kontinuumban keletkező mechanikai feszültségek tenzora két részre bontható. Az egyik rész a deformáció függvénye, így anyagi egyenletekkel megadható; a másik rész a kényszerek következtében lép fel, és csak a határfeltételekből határozható meg, egy konkrét feladat kapcsán. Következésképpen:

$$t_{ij} = r_{ij} + s_{ij},$$

ahol t_{ij} a teljes feszültség (Cauchy-féle), r_{ij} a kényszerek miatt fellépő ún. „reakció” feszültség, s_{ij} pedig az anyagi tulajdonságok által determinált ún. „extra” feszültség tenzorkomponensei (*Spencer*, 1972). Inkompresszibilis anyag esetében a reakciófeszültség egy p hidrosztatikus nyomás. A nyújthatatlan rostokban ezenkívül egy pozitív húzófeszültség is keletkezik. Ha két rostcsalád van jelen, melyek irányát az **a** és **b** egységvektorok jellemzik, akkor a reakciófeszültség komponensei

$$r_{ij} = -p_{ij} + T_a a_i a_j + T_b b_i b_j, \quad (4)$$

azaz a teljes feszültség

$$t_{ij} = -p_{ij} + T_a a_i a_j + T_b b_i b_j + s_{ij}.$$

Itt az általánosság rovása nélkül feltehetjük, hogy

$$s_{ii} = 0$$

és

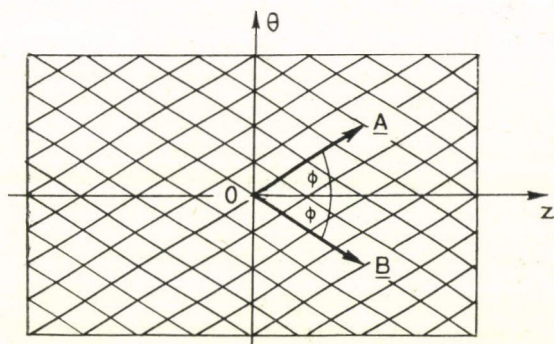
$$a_i a_j s_{ij} = 0, \quad b_i b_j s_{ij} = 0. \quad (5)$$

Tekintsük most egy inkompresszibilis, helikálisan futó rostcsaládokkal merevített, hengerszimmetrikus cső torziómentes deformációját!

Legyenek a kezdeti és deformált rostirányok \mathbf{A} , \mathbf{B} , ill. \mathbf{a} , \mathbf{b} és legyenek

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= (0, \sin \Phi, \cos \Phi), \\ \mathbf{B} &= (0, -\sin \Phi, \cos \Phi), \\ \mathbf{a} &= (0, \sin \varphi, \cos \varphi), \\ \mathbf{b} &= (0, -\sin \varphi, \cos \varphi), \end{aligned} \quad (6)$$

ahol Φ és φ a cső tengelyével bezárt szögek (3. ábra).



3. ábra. A kétdimenziós szerkezeti modell kezdeti rostirányai a θz felületben. A homogén, folytonos hálózatot alkotó rostok az érfal-modellben két helikális rostcsaládba rendeződnek

Az anyagi szimmetriák miatt (4)-ből:

$$r_{r\theta} = r_{rz} = 0,$$

továbbá mivel szimmetrikus rostozat esetében $T_a = T_b$, ezért

$$r_{z\theta} = (T_a - T_b) \sin \varphi \cos \varphi = 0.$$

Így a reakció-feszültség nem eltűnő komponensei (4)-ből:

$$\begin{aligned} r_r &= -p, \\ r_\theta &= -p + 2T \sin^2 \varphi, \\ r_z &= -p + 2T \cos^2 \varphi, \end{aligned} \quad (7)$$

ahol $T = T_a = T_b$. (A két azonos indexet tartalmazó tenzorkomponensek jelölésénél az egyszerűség kedvéért csak egy indexet írtunk ki.)

Az anyagi szimmetriák miatt hasonlóképpen zérusok az extrafeszültség nyírókomponensei is:

$$s_{r\theta} = s_{\theta z} = s_{zr} = 0.$$

Izotrop, inkompresszibilis, lineáris alapanyag esetén tehát a teljes feszültség nem eltűnő komponensei a következők:

$$\begin{aligned} t_r &= -p + Ee_r \\ t_\theta &= -p + 2T \sin^2 \varphi + Ee_\theta \\ t_z &= -p + 2T \cos^2 \varphi + Ee_z, \end{aligned} \quad (8)$$

ahol E az izotrop Young-modulus.

Hengerkoordináta-rendszerben a tangenciális és axiális nyúlásarányok definíciója:

$$\lambda_\theta = \frac{R}{R_0}, \quad \lambda_z = \frac{L}{L_0}, \quad (9)$$

ahol R és R_0 , ill. L és L_0 a rosthenger sugarai, ill a cső hossza deformált és deformálatlan állapotban. Könnyen belátható, hogy adott λ_θ , λ_z nyúlásarányokkal jellemzett deformáció esetén a z -tengellyel kezdetben Φ szöget bezáró vonalelem nyúlásaránya:

$$\lambda = (\lambda_\theta^2 \sin^2 \Phi + \lambda_z^2 \cos^2 \Phi)^{1/2}. \quad (10)$$

Így a deformálatlan állapotban Φ szögű rostok nyújthatatlanságának feltétele

$$\lambda_\theta^2 \sin^2 \Phi + \lambda_z^2 \cos^2 \Phi = 1. \quad (11)$$

Ha most a λ_θ , λ_z nyúlásarányokkal jellemzett kezdeti deformációra még egy kis, ún. inkrementális elmozdulást teret szuperponálunk, úgy a nyújthatatlansági feltétel a következő alakú:

$$e_\theta \sin^2 \varphi + e_z \cos^2 \varphi = 0, \quad (12)$$

az érfal inkompresszibilitását pedig a következő feltétel fejezi ki:

$$e_r + e_\theta + e_z = 0, \quad (13)$$

ahol e_r , e_θ és e_z az ún. inkrementális megnyúlások:

$$e_r = \frac{\Delta h}{h}, \quad e_\theta = \frac{\Delta R}{R}, \quad e_z = \frac{\Delta L}{L}. \quad (14)$$

(h : a cső falának vastagsága).

3. Rostsűrűség és rostszőgek

A kétdimenziós szerkezeti modellben a rostokkal merevített fázis x részaránya és az aktuális φ rostszőg általános esetben a tangenciális és axiális nyúlásarányoktól, és a kezdeti Φ rostszőgtől függhet:

$$x = x(\lambda_\theta, \lambda_z, \varphi)$$

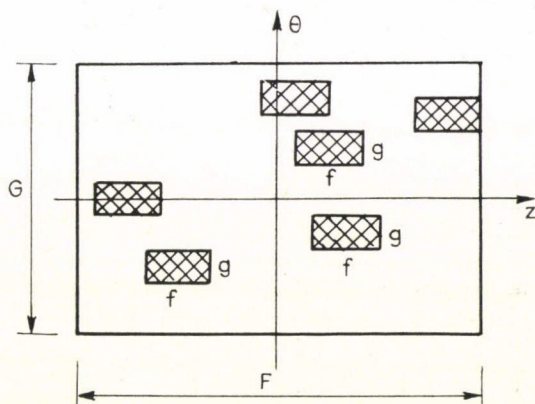
$$\varphi = \varphi(\lambda_\theta, \lambda_z, \varphi).$$

Azonban az adott deformációnál éppen megfeszülő rostok száma, és így x is közvetlenül csak a rostirányban bekövetkező megnyúlás függvénye:

$$x = x(\lambda),$$

ahol λ -t a (10) egyenlettel már definiáltuk.

Az alapanyag rostokkal való merevítését úgy képzelhetjük el, mintha egy F , G élhosszúságú téglalapot n db f , g élhosszúságú kis téglalappal véletlenszerű eloszlásban fednénk le (4. ábra). Ekkor $x = nfg/FG$. A lefedést egyenletessé tehetjük, ha $fg \rightarrow 0$, miközben $nfg = \text{áll}$. Feltételezve, hogy síkdeformációk esetén a rostok egy egész felületsávban korlátozzák a deformációt bebizonyítható, hogy axiális izometria esetén az anyag nyújthatatlanná válik, ha $n \equiv G/g$, tangenciális izometria esetén pedig, ha $n \equiv F/f$.



4. ábra. A rosthálózatnak a teherviselésbe való fokozatos bekapcsolódásának modellje. Az ábrán véletlenszerűen elhelyezett kis f , g élhosszú, téglalap alakú rosthálóelemek a matematikai modellben végtelenül kicsinyek és homogén eloszlásúak

Ezért az x „felületi” sűrűség két „lineáris” sűrűség szorzatára bontható:

$$x = x_\theta x_z = \left(\sqrt{n} \frac{g}{G} \right) \left(\sqrt{n} \frac{f}{F} \right),$$

ahol x_θ -t az egy dimenziós modellben bevezetett (2) alatti sűrűséggel azonosíthatjuk. x_θ ismeretében egy konstans faktortól eltekintve x meghatározható:

$$x = K x_\theta^2, \quad (15)$$

ahol

$$K = fG/Fg.$$

A rostszőg kiszámításánál figyelembe kell vennünk, hogy laza vagy feszes rostokról van-e szó; a két fázis (ti. a szabad és a rostokkal merevített alapanyag) ugyanis

másképpen deformálódik. Laza rostokra nézve (1-es fázis) közvetlenül belátható, hogy

$$\varphi^{(1)} = \arctg \left(\frac{\lambda_\theta}{\lambda_z} \operatorname{tg} \Phi \right). \quad (16)$$

Fesztes rostokra nézve (2-es fázis) a (11) nyújthatatlansági feltételekből következően:

$$\varphi^{(2)} = \arctg \frac{\lambda_\theta \sin \Phi}{(1 - \lambda_\theta^2 \sin^2 \Phi)^{1/2}},$$

vagy

$$\Phi^{(2)} = \arctg \frac{(1 - \lambda_z^2 \cos^2 \Phi)^{1/2}}{\lambda_z \cos \Phi}$$

feltéve, hogy $T(\lambda_\theta, \lambda_z) \geq 0$. Így nyilvánvaló, hogy általában bármely λ_θ , λ_z nyúlásarányokkal jellemzett deformációnál az egyes rostok tengellyel bezárt szöge egymással nem azonos, hanem a rostszőgek folytonos eloszlás szerint változnak. A szögeloszlás egzakt meghatározása rendkívül bonyolult lenne, mivel az a két fázis egyelőre ismeretlen deformációviszonyaitól függ. Jelen céljainkhoz azonban elegendő, ha a „szögdiszperzió” közelítő figyelembevételére bevezetünk egy átlagos rostszőget. A későbbiekben olyan deformációk vizsgálatára fogunk szorítkozni, ahol a tengelyirányú megnyúlás konstans. Feltételezhetjük, hogy ilyenkor a feszes rostokat hordozó 2-es fázis alakváltozása elhanyagolható az axiális izometria által gyakorlot kényszer miatt. Így adott tangenciális megnyúlásnál az átlagos rostszőg értéke:

$$\bar{\varphi}(\lambda_\theta) = \int_1^{\lambda_\theta} \varphi^{(1)}(\lambda'_\theta) dx(\lambda'_\theta). \quad (17)$$

4. A Poisson-számok meghatározása a szerkezeti modellből

Az inkrementális Poisson-számok a kontinuum különböző térirányokban bekövetkező infinitezimális deformációinak arányát jellemzik, a kontinuum egy tetszőlegesen deformált kezdeti állapotában. Hengeresen ortotrop esetben 6 Poisson-szám van. Definíció szerint l irányú terhelő feszültség esetén

$$\sigma_{kl} = -\frac{e_k}{e_l} \quad (k, l = r, \theta, z). \quad (18)$$

Szerkezeti modellünk szerint a teljes megnyúlás a két fázis megnyúlásának eredője:

$$e_k = (1-x)e_k^{(1)} + xe_k^{(2)} \quad (k = r, \theta, z),$$

így a Poisson-számokra nézve:

$$\sigma_{kl} = -\frac{(1-x)e_k^{(1)} + xe_k^{(2)}}{(1-x)e_l^{(1)} + xe_l^{(2)}}. \quad (19)$$

Minden σ_{kl} kiszámításához további három deformációkomponensek közti összefüggésre van szükség. Azonos fázis deformációkomponensei között a fázis saját Poisson-

számai teremtenek összefüggést. Az alapanyag izotrópiája miatt az 1-es fázisban $\sigma_{kl} = 1/2$, ($k, l = r, \theta, z$, $k \neq l$).

A 2-es fázis Poisson-számait a (12) nyújthatatlansági és a (13) inkompresszibilitási feltétel felhasználásával kaphatjuk:

$$\begin{aligned}\sigma_{\theta z} &= \operatorname{ctg}^2 \varphi, & \sigma_{rz} &= 1 - \operatorname{ctg}^2 \varphi, \\ \sigma_{\theta\theta} &= \operatorname{tg}^2 \varphi, & \sigma_{r\theta} &= 1 - \operatorname{tg}^2 \varphi, \\ \sigma_{\theta r} &= \frac{1}{1 - \operatorname{tg}^2 \varphi}, & \sigma_{zr} &= \frac{1}{1 - \operatorname{ctg}^2 \varphi}.\end{aligned}\quad (20)$$

A hiányzó harmadik egyenlet felállításához statikai megfontolásokra is szükség van. Feltételeink szerint a két fázis inkrementális alapegyenletei (8) alapján a következők:

$$\begin{aligned}t_r^{(1)} &= -p + Ee_r^{(1)}, \\ t_\theta^{(1)} &= -p + Ee_\theta^{(1)}, \\ t_z^{(1)} &= -p + Ee_z^{(1)},\end{aligned}\quad (21)$$

illetve

$$\begin{aligned}t_r^{(2)} &= -p + Ee_r^{(2)}, \\ t_\theta^{(2)} &= -p + 2T \sin^2 \varphi + Ee_\theta^{(2)}, \\ t_z^{(2)} &= -p + 2T \cos^2 \varphi + Ee_z^{(2)}.\end{aligned}\quad (22)$$

Mivel a terhelés szempontjából a laza és feszes rostokat hordozó fázisok mechanikailag sorba vannak kapcsolva, az egyes feszültségkomponenseknek a két fázisban azonosnak kell lenniük. Így (21) és (22) megfelelő egyenleteit összehasonlítva:

$$E(e_\theta^{(1)} - e_\theta^{(2)}) = 2T \sin^2 \varphi, \quad (23a)$$

$$E(e_z^{(1)} - e_z^{(2)}) = 2T \cos^2 \varphi, \quad (23b)$$

ahonnan a hiányzó harmadik egyenlet:

$$e_\theta^{(1)} - e_\theta^{(2)} = \operatorname{tg}^2 \varphi (e_z^{(1)} - e_z^{(2)}). \quad (24)$$

Innentől külön kell tárgyalnunk azokat az eseteket, ahol radiális, tangenciális, vagy axiális irányú a külső terhelő feszültség.

(A) $\sigma_{\theta z}$ és σ_{rz} számítása

Az alapanyag izotrópiája miatt, illetve (20-ból) következik, hogy

$$\begin{aligned}e_\theta^{(1)} &= e_r^{(1)} = -\frac{e_z^{(1)}}{2}, \\ e_\theta^{(2)} &= -\operatorname{ctg}^2 \varphi e_z^{(2)}, \\ e_r^{(2)} &= (\operatorname{ctg}^2 \varphi - 1) e_z^{(2)}.\end{aligned}$$

Fenti egyenlőségeket (19)-be helyettesítve, továbbá (24) felhasználásával $k=\theta$, $l=z$, ill. $k=r$, $l=z$ esetre kapjuk, hogy:

$$\sigma_{\theta z} = \frac{(1-x)\alpha/2 + x \operatorname{ctg}^2 \varphi}{(1-x)\alpha + x}, \quad (25a)$$

$$\sigma_{rz} = \frac{(1-x)\alpha/2 + x(1 - \operatorname{ctg}^2 \varphi)}{(1-x)\alpha + x}, \quad (25b)$$

ahol

$$\alpha = \frac{e_z^{(1)}}{e_z^{(2)}} = \frac{1 + \operatorname{ctg}^4 \varphi}{1 + \operatorname{ctg}^2 \varphi/2}. \quad (26)$$

Eddig figyelmen kívül hagytuk, hogy a T rostfeszültségnek pozitívnak kell lennie. (26)-ot (23b)-be helyettesítve közvetlenül adódik:

$$2T = \frac{E}{\sin^2 \varphi} = \frac{2\operatorname{ctg}^2 \varphi - 1}{\operatorname{ctg}^2 \varphi + 2} e_z^{(2)}.$$

Ha a külső húzófeszültség $t_z > 0$, akkor nyilván $e_z > 0$. Így a $T \geq 0$ feltétele

$$\operatorname{ctg}^2 \varphi = \frac{1}{2}, \quad (27)$$

(B) $\sigma_{z\theta}$ és $\sigma_{r\theta}$ számítása.

A fentiekhez hasonlóan most

$$e_z^{(1)} = e_r^{(1)} = -\frac{e_\theta^{(1)}}{2},$$

$$e_z^{(2)} = -\operatorname{tg}^2 \varphi e_\theta^{(2)},$$

$$e_r^{(2)} = (\operatorname{tg}^2 \varphi - 1)e_\theta^{(2)},$$

és (19)-be helyettesítve (24) felhasználásával:

$$\sigma_{z\theta} = \frac{(1-x)\beta/2 + x \operatorname{tg}^2 \varphi}{(1-x)\beta + x}, \quad (28)$$

$$\sigma_{r\theta} = \frac{(1-x)\beta/2 + x(1 - \operatorname{tg}^2 \varphi)}{(1-x)\beta + x},$$

ahol

$$\beta = \frac{e_\theta^{(1)}}{e_\theta^{(2)}} = \frac{1 + \operatorname{tg}^4 \varphi}{1 + \operatorname{tg}^2 \varphi/2}. \quad (29)$$

$T \geq 0$ feltételét (29)-et (23b)-be helyettesítve kapjuk:

$$\operatorname{tg}^2 \varphi \geq \frac{1}{2}. \quad (30)$$

(C) $\sigma_{\theta r}$ és σ_{zr} számítása.

Ez esetben

$$\begin{aligned} e_{\theta}^{(1)} &= e_z^{(1)} = -\frac{e_r^{(1)}}{2}, \\ e_{\theta}^{(2)} &= \frac{e_r^{(2)}}{\operatorname{tg}^2 \varphi - 1}, \\ e_z^{(2)} &= \frac{e_r^{(2)}}{\operatorname{ctg}^2 \varphi - 1}. \end{aligned} \quad (31)$$

Következésképpen:

$$\begin{aligned} \sigma_{\theta r} &= \frac{(1-x)\gamma + x/(1-\operatorname{tg}^2 \varphi)}{(1-x)\gamma + x}, \\ \sigma_{zr} &= \frac{(1-x)\gamma + x/(1-\operatorname{ctg}^2 \varphi)}{(1-x)\gamma + x}, \end{aligned} \quad (32)$$

ahol

$$\gamma = \frac{e_r^{(1)}}{e_r^{(2)}} = 2 \frac{\cos^4 \varphi + \sin^4 \varphi}{(\cos 2\varphi)^2}. \quad (33)$$

A rostfeszültség értékét (23)-ból (31) és (33) behelyettesítésével nyerjük:

$$2T = -\frac{Ee_r^{(2)}}{(\cos 2\varphi)^2}.$$

Így $T \geq 0$, ha $e_r^{(2)} \leq 0$. Mivel az erek elasztikus tágításakor a falvastagság csökken, minket éppen az az eset érdekel, amikor $e_r^{(2)} < 0$. $\varphi = 45^\circ$ -nál $T \rightarrow \infty$, ami azt jelenti, hogy bármekkora radiális nyomófeszültség mellett $e_r^{(2)} = 0$, azaz $\varphi = 45^\circ$ -nál az érfal radiálisan összenyomhatatlan (ún. „locking” jelenség, *Spencer, 1972*).

5. A kezdeti anizotrópia figyelembevétele

Eddig kifejtett elméletünkben az alapanyagot izotropnak tekintettük. A kísérleti eredmények szerint az artériákat in vivo hosszuknak megfelelően tengelyirányban megnyújtva, az érfal zérus intraluminális nyomás mellett is anizotrop. Ezen „kezdeti” állapotban mutatott anizotrópia kézenfekvően a teherviselő kollagén rostok jelenlétének következménye. Modellünkben a kezdeti anizotrópiának a helikális rostozattal való figyelembe vétele azonban nem vezetett a tapasztalatnak megfelelő eredményekre. Ezért számításaink során a Poisson-számok (25), (28) és (32) kifejezéseinek számlálójában, az első tagban az izotrop feltétel miatt megjelenő 1/2-es faktort a zérus nyomásnál mért megfelelő Poisson-számok értékeivel helyettesítettük. Hangsúlyozzuk, hogy ez csak empirikus közelítés, a kezdeti anizotrópia következetes leírását egy további roststruktúrával, a (3) és (4) egyenletekben az alapanyag anizotroppá tételével lehetne megtenni. Jelenleg azonban nem állnak rendelkezésünkre az általánosítás elvégzéséhez szükséges megfelelő pontosságú mérési adatok.

POISSON-SZÁMOK MEGHATÁROZÁSA A DEFORMÁCIÓS ENERGIA FÜGGVÉNYBŐL

Szerkezeti modellünk ellenőrzése céljából a Poisson-számokat mérési adatokból is meg kívántuk határozni. Az ehhez szükséges kontinuum-elméleti megfontolásokat ismertetjük az alábbiakban. Tegyük fel, hogy az érfalnak létezik deformációs energia függvénye. (A deformációs energia függvény létezése általánosságban nem evidens, azonban elasztikus anyagok izotermikus vagy adiabatikus állapotváltozásai esetén mindig létezik ilyen függvény (*Landau és Lifsic, 1974*)).

A deformációs energia függvény a deformációs energia sűrűségét (az egységnyi faltérfogatban tárolt rugalmas energiát) a deformációs állapot függvényében adja meg. Egy homogén, inkompresszibilis, hengeresen ortotrop rugalmas test esetében a W deformációs energia függvény kifejezhető, mint:

$$W = W(\lambda_\theta, \lambda_z),$$

ahol λ_θ és λ_z a (9) alatt definiált nyúlásarányok). W ismeretében az érfalban keletkező feszültségek (a Cauchy-féle feszültségtenzor fizikai komponensei) a következő összefüggések szerint számíthatók ki (*Vaishnav és mtsai, 1973*):

$$\begin{aligned} t_\theta - t_r &= \lambda_\theta \frac{\partial W}{\partial \lambda_\theta}, \\ t_z - t_r &= \lambda_z \frac{\partial W}{\partial \lambda_z}. \end{aligned} \tag{34}$$

A fenti egyenletek az érfal nemlineáris rugalmas alapegyenletei. Munkaponti lineárizálásukkal az érfal inkrementális rugalmas alapegyenletei nyerhetők:

$$\begin{aligned} \Delta t_\theta - \Delta t_r &= B_1 e_\theta + B_2 e_z, \\ \Delta t_z - \Delta t_r &= B_2 e_\theta + B_3 e_z, \end{aligned}$$

ahol e_θ és e_z a (14) alatt definiált inkrementális megnyúlások.

A B_1, B_2, B_3 inkrementális rugalmassági modulusok a deformációs energia függvény parciális deriváltjaival fejezhetők ki:

$$\begin{aligned} B_1 &= \lambda_\theta \frac{\partial W}{\partial \lambda_\theta} + \lambda_\theta^2 \frac{\partial^2 W}{\partial \lambda_\theta^2}, \\ B_2 &= \lambda_\theta \lambda_z \frac{\partial^2 W}{\partial \lambda_\theta \partial \lambda_z}, \\ B_3 &= \lambda_z \frac{\partial W}{\partial \lambda_z} + \lambda_z^2 \frac{\partial^2 W}{\partial \lambda_z^2}. \end{aligned} \tag{35}$$

Megjegyezzük, hogy a B_1 inkrementális modulus azonos a korábban (3) alatt definiált B modulussal. A hengeresen ortotrop érfal inkrementális Poisson-számainak definícióját (18) alatt már megadtuk. Kevés számolással belátható (*Vaishnav és mtsai,*

1973), hogy:

$$\begin{aligned}\sigma_{\theta z} &= \frac{B_2}{B_1}, & \sigma_{rz} &= \frac{B_1 - B_2}{B_1}, \\ \sigma_{z\theta} &= \frac{B_2}{B_3}, & \sigma_{r\theta} &= \frac{B_3 - B_2}{B_3}, \\ \sigma_{\theta r} &= \frac{B_3 - B_2}{B_1 - 2B_2 + B_3}, & \sigma_{zr} &= \frac{B_1 - B_2}{B_1 - 2B_2 + B_3}.\end{aligned}\quad (36)$$

A fenti hat Poisson-szám közül csak három független, ugyanis az inkompresszibilitás miatt fennáll a következő összefüggés:

$$\sigma_{\theta z} + \sigma_{rz} = \sigma_{z\theta} + \sigma_{r\theta} = \sigma_{\theta r} + \sigma_{zr} = 1, \quad (37)$$

vagy más alakban:

$$\sigma_{\theta z} \sigma_{z\theta} + \sigma_{zr} \sigma_{rz} + \sigma_{r\theta} \sigma_{\theta r} = 1.$$

Ha az érfal deformációs energia függvénye ismert, a (35) és (36) formulák felhasználásával a Poisson-számok kiszámíthatók. A deformációs energia függvény konkrét alakját azonban nem lehet fizikai megfontolásokból levezetni, mivel az a konkrét anyagi minőségtől függ. Így alapvető probléma egy alkalmas $W(\lambda_\theta, \lambda_z)$ modellfüggvény megtalálása. Korábbi vizsgálataink szerint (Hudetz és mtsai, 1975) az érfal deformációs energia függvénye jól közelíthető a következő 4 paraméteres exponenciális függvénnyel:

$$W = W_0 + W_1 \exp(A + B\varepsilon_\theta^2 + C\varepsilon_\theta\varepsilon_z + D\varepsilon_z^2), \quad (38)$$

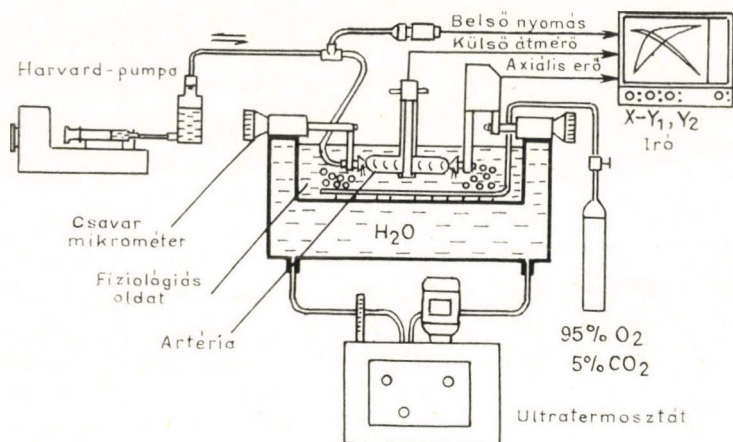
ahol

$$\varepsilon_\theta = \frac{1}{2}(\lambda_\theta^2 - 1), \quad \varepsilon_z = \frac{1}{2}(\lambda_z^2 - 1),$$

a Lagrange-féle nyúlástenzor megfelelő fizikai komponensei. Jelen munkákban ezért a fenti deformációs energia függvényt alkalmaztuk a Poisson-számok kiszámítására.

MÉRÉSI MÓDSZEREK

A számításokhoz szükséges mechanikai jellemzők (nyúlásmértékek, rugalmassági modulus stb.) meghatározására kutyákból izolált a. carotis communis és a. iliaca cilindrikus szakaszain végeztünk in vitro méréseket. A laza adventiciális kötőszövet eltávolítása után az erekből lehetőleg egyenes, 10–30 mm hosszú elágazásmentes hengeres szakaszokat metszettünk ki. A preparálás ideje alatt az artériákat 37 °C-os oxigenizált fiziológiás oldatban tartottuk. Az ereket mindkét végükön lumenükbe illeszkedő méretű hengeres műanyag kanülökre kötöttük, és azoknál fogva rögzítettük a mérőberendezésben. A mérőberendezés vázlatát az 5. ábrán láthatjuk. Az intraluminális nyomás lassú (100 Hgmm/min) változtatásával ún. kvázi-statisztikus mechanikai tesztet végeztünk az érfalon. A nyomást levegő egyenletes befúvásával és kiengedésével (Harvard pumpa, Model 907) 5–250 Hgmm tartományban változtattuk. A mérés alatt az ér in vivo hosszára volt nyújtva (axiális izometria). Az axiális megnyújtás mértékét úgy állítottuk be, hogy 250 Hgmm belső nyomás mellett az axiális



5. ábra. Cilindrikus artériaszakaszok kvázi-statisztikus mechanikai tulajdonságainak meghatározására alkalmazott in vitro mérőberendezés vázlata. A 37 °C-ra temperált és oxigenizált fiziológiai oldatba merülő artéria nyomásterhelése elektromosan vezérelt infúziós pumpával változtatható; a nyomás, az ér külső átmérője és a tengelyirányú húzóerő folyamatosan mérhető

nyújtóerő éppen zérus legyen. Ekkor tapasztalatunk szerint az ér hossza közelítőleg megegyezik in vivo hosszával. Az ér hossz pontos beállítására 0,02 mm-es beosztású csavarmikrométerek szolgáltak. A nyomásciklusok alatt folyamatosan regisztráltuk az intraluminális nyomást (Statham P23 Dc), az ér külső átmérőjét és az axiális nyújtóerőt. Az átmérő és az erő jelátalakítók egyedi tervezésű félvezető nyúlásmérő bélyeges jelátalakítók voltak (SOTE, KKK és II. Élettani Int.). A jeleket kétsatornás $X-Y$ író (Riken Denshi, D—72 B) rajzoltuk ki. A mérés ideje alatt az artériát 95% O_2 , 5% CO_2 -vel átbuborékolatott, ultrathermosztáttal (MLW, U—10) temperált $37 \pm 0,2$ °C-os fiziológiai elektrolitglukóz pufferoldat vette körül. Az oldat mennyisége 90 ml, összetétele mmol/l-ben a következő volt: 116,5 NaCl, 22,5 $NaHCO_3$, 1,2 NaH_2PO_4 , 2,4 Na_2SO_4 , 4,5 KCl, 1,2 $MgSO_4$, 2,5 $CaCl_2$, és 5,6 $C_6H_{12}O_6$. A számítások céljára felhasznált nyomásátmérő és nyomás-axiális nyújtóerő karakterisztikák felvétele előtt 10–20 nyomásciklussal mechanikusan kondicionáltuk az artériákat. Ez az érfal simaizmok teljes relaxálódását és a passzív karakterisztikák reprodukálhatóságát biztosította. A Poisson-számok deformációs energia függvényéből való meghatározásához a mérést megismételtük 3–5 különböző ér hossz mellett. A mérés után az artériát hosszanti irányban felmetszettük, deformálatlan közepes kerületét és hosszát mérőmikroszkóppal, ill. tolómércével, nedves súlyát (mely a falvastagság meghatározásához volt szükséges) analitikai mérleg (ZMP, WA—33) segítségével mértük meg. A mérőberendezés és a mérési módszerek további részleteit illetően lásd (Cox, 1974; Monos és mtsai, 1977a; Hudetz, 1977).

SZÁMÍTÁSI MÓDSZEREK

A mérési adatok feldolgozását a Semmelweis OTE Számítástechnikai Csoportjának R20 típusú számítógépével végeztük. A mért alapadatokból (P intraluminális nyomás, D külső átmérő, F axiális nyújtóerő, L ér hossz, V faltérfogat) először az érfal közepes sugarát (R) és falvastagságát (h) határozzuk meg. A faltérfogat állandóságából következően:

$$R = \left[\left(\frac{D}{2} \right)^2 - \frac{V}{2\pi L} \right]^{1/2},$$

$$h = \frac{V}{2\pi RL}.$$

A szerkezeti modell számításához a B modulust a

$$B = \frac{\Delta P}{\Delta R} \frac{R^3}{R_0 h_0} + \frac{2PR^2}{R_0 h_0},$$

vékony falú erekre érvényes formulából számítottuk ki (R_0 és h_0 az ér közepes sugara és falvastagsága zérus intraluminális nyomásnál). A lineáris rostsűrűséget (2) alapján számoltuk. Itt feltételeztük, hogy zérus nyomásnál $B=B_0$, azaz $x_\theta=0$. A felületi rostsűrűséget (15) szerinti közelítéssel, a Poisson-számokat (25), (26), (28), (29), (32) és (33) felhasználásával több különböző K és Φ mellett értékeltük ki. Φ -t fokozatosan, K -t 0,02-onként változtattuk, a (27) és (30) feltételek által korlátozott érvényességi tartományban. Célunk ezzel elsősorban az optimális Φ meghatározása volt. A szögfüggvények kiszámításánál a (17) szerint megadott átlagos rostszőget alkalmaztuk. Minden mennyiséget 10 Hgmm nyomásszintenként számoltuk ki, 0–250 Hgmm tartományban.

A Poisson-számok közvetlen meghatározásához szükség volt az érfalban keletkező átlagos feszültségek kiszámítására is. Mint könnyen ellenőrizhető:

$$S_\theta - S_r = \frac{PR}{h},$$

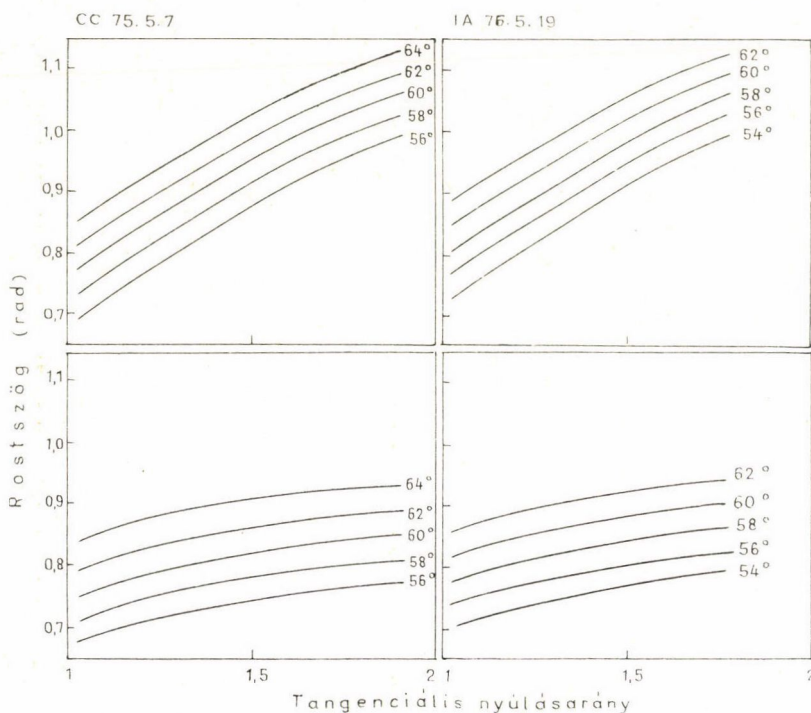
$$S_z - S_r = \frac{F}{2\pi R h} + \frac{PR}{2h},$$

(S_r =radiális, S_θ =tangenciális, S_z =axiális átlagos feszültség). Az (5) alatti exponenciális deformációs energia függvény paramétereinek meghatározása a (34) egyenlőségekkel adott feszültség-értékeknek, a fenti mérési adatokból számított feszültségértékekre való számítógépes illesztésével történt. $t_\theta - t_r$ és $t_z - t_r$ kétváltozós függvények ($\lambda_\theta, \lambda_z$ függvényei), tehát egy-egy felületet határoznak meg. Mivel a feszültségek kifejezéseit a (38) deformációs energia függvényéből származtattuk, ezért $t_\theta - t_r$ és $t_z - t_r$ explicit alakjában azonos paraméterek is szerepelnek. Itt tehát nem egyszerű görbeillesztéseket, hanem két felület szimultán illesztését kellett elvégezni. Mivel ez esetben a legkisebb négyzetek elvéből adódó normál egyenletrendszer a paraméterekben nem lineáris, az ismeretlen paramétereket úgy kerestük meg, hogy a hibafüggvényt minimalizáltuk a paraméterek függvényében. A hibafüggvény mini-

malizálására a Broyden—Fletcher—Schanno-féle (BFS) kvázi-Newton módszert (Gill és Murray, 1972) alkalmaztuk mely kihasználja, hogy a modell-függvény paraméterek szerinti deriváltjait analitikusan ismerjük. A BFS algoritmus jelenleg a legstabilabb általános függvényminimalizáló eljárás. Mivel ez a módszer csak lokális minimumot keres, a globális minimum megtalálása érdekében több kezdőpontból indítottuk a minimumkeresést. A deformációs energia függvény meghatározásával és a számítógépi illesztéssel kapcsolatos további részleteket illetően lásd: Hudetz és mtsai (1975).

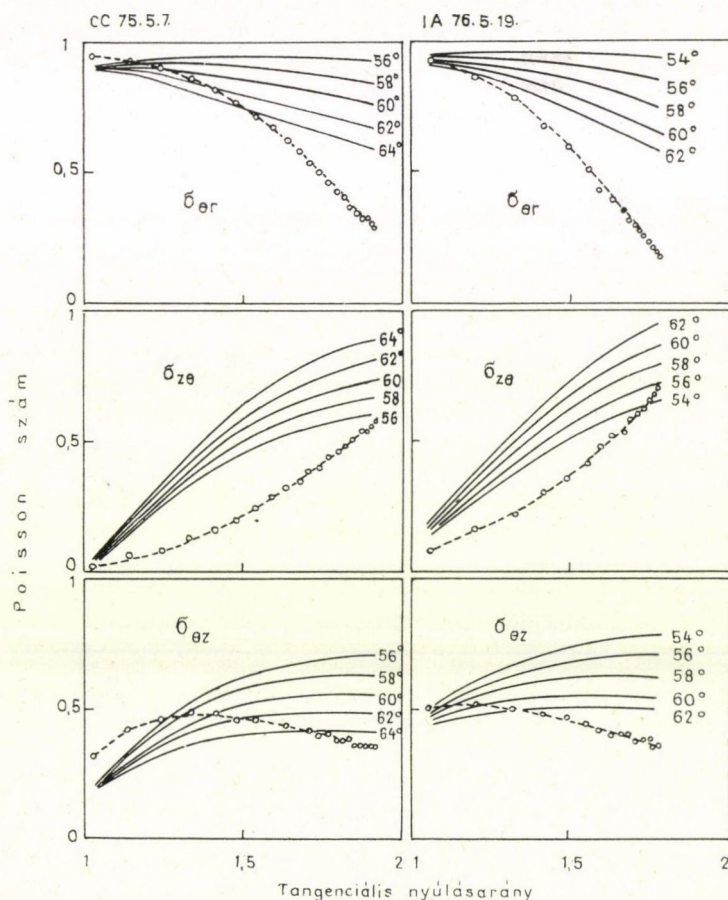
EREDMÉNYEK ÉS DISZKUSSZIÓ

A kétdimenziós szerkezeti modellből számított inkrementális Poisson-számok tulajdonságait egy-egy artéria carotis communis, ill. iliaca példáján demonstruáljuk, melyek esetében a deformációs energia függvényből származtatott feszültségek illeszkedése aránylag a legjobb volt. Így a szerkezeti modellből kiértékelt Poisson-számokat a mérési adatokból számolt legpontosabb Poisson-számokkal vethetjük össze. A 6. ábrán a laza rostok szögének, és a feszes rostok átlagos rostszögének a tangenciális nyúlásarány függvényében való változását láthatjuk a két artéria esetében, különböző



6. ábra. A laza rostok szögének (felül) és a feszes rostok átlagos szögének (alul) változása a tangenciális nyúlásarány függvényében egy a. car. comm. (bal oldalt) és egy a. iliaca (jobb oldalt) esetén különböző kezdeti rostszögek mellett

kiindulási Φ rostszögek mellett. Mint a számítási módszerek tárgyalásánál már említettük, vizsgálatainkban több különböző Φ és K paramétert alkalmaztunk. A (27) és (30) feltételek Φ értékét minden esetben viszonylag szűk tartományra korlátozták. A modell kevésbé volt érzékeny K értékére. Így közel egyformán jó eredményeket kaptunk $K=0,6-0,9$ tartományban. A K hatása lényegében annyi volt, hogy nagyobb K esetén a jó megoldásokra vezető Φ szögek tartománya szűkebb volt. Pl. az a. car. comm. esetében $K=0,6$ -nál $\Phi=55-65^\circ$ tartományban, $K=0,9$ -nél $\Phi=57-59^\circ$ között változhatott. A 7. ábrán $K=0,7$ faktorhoz és különböző Φ -khez tartozó görbéket tüntettünk fel. Látható, hogy a kiindulási rostszög változtatása az



7. ábra. A kétdimenziós szerkezeti modellből különböző kezdeti rostszögek mellett számított inkrementális Poisson-számok (folytonos vonal) összehasonlítása az exponenciális deformációs energia függvényből számított inkrementális Poisson-számokkal (szaggatott vonal). Az axiális nyújtásfok az a. car. comm. esetében (bal oldalt) $\lambda_z=1,85$, az a. iliaca esetében (jobb oldalt) $\lambda_z=1,60$ volt

eredményeket csak kvantitatíve változtatja meg. A deformációs energia függvényből számított „tapasztalati” görbékkel összehasonlítva megállapíthatjuk, hogy az ábrán feltüntetett Poisson-számok a vártnak megfelelő irányban változnak az intraluminális nyomástól függő tangenciális megnyúlás függvényében. Jelentősebb eltérés $\sigma_{\theta z}$ esetében mutatkozik. (A másik három Poisson-számot nem tüntettük fel, mivel azok (37) miatt ezek tükörképei). Hogyan értelmezhetjük a Poisson-számok változását a feltételezett rostszerkezet alapján? A radiális kompresszió hatására bekövetkező tangenciális megnyúlás arányát jellemző $\sigma_{\theta r}$ csökkenése növekvő tangenciális megnyúlásnál nyilvánvalóan a tangenciális irány felé forduló rostok hatásának következménye. Hasonló a helyzet a tangenciális nyújtás hatására létrejövő axiális összehúzódás mértékét jellemző $\sigma_{z\theta}$ -val, mely annál nagyobb, minél nagyobb a tangenciális megnyúlás, ill. annak következtében az átlagos rostszőg. Bonyolultabb a helyzet az axiális nyújtás hatását jellemző $\sigma_{\theta z}$ Poisson-számmal. Az egyetlen általunk ismert releváns irodalmi adat szerint (Cox, 1975) zérus intraluminális nyomás, azaz $\lambda_\theta = 1$ közelében $\sigma_{\theta z} \approx 1$, és növekvő tangenciális megnyúlásnál $\sigma_{\theta z}$ monoton csökken. Az exponenciális deformációs energiafüggvény alkalmazásával végzett saját korábbi vizsgálataink (Hudetz és mtsai, 1975) és jelen eredményeink ennek egyaránt ellentmondanak a tekintetben, hogy szerintünk $\sigma_{\theta z}$ zérus és 1/2 közötti értékről indul. Ezt az eredményt most szerkezeti modellünk is egyértelműen alátámasztja. $\sigma_{\theta z}$ kezdeti növekedését a szerkezeti modellben x gyors növekedése okozza, melyet nagyobb tangenciális megnyúlások felé haladva α csökkenése ellensúlyoz (lásd (25a) formula). A modell itt már nem tudja pontosan követni $\sigma_{\theta z}$ változási tendenciáját. Mindazonáltal a 62°-os kezdeti rostszőghöz tartozó görbe nem tér el nagyon $\sigma_{\theta z}$ mérési adatokból számított értékeitől.

Összefoglalva megállapíthatjuk, hogy szerkezeti modellünk általában a tapasztalatnak megfelelően adja vissza a mechanikai csatolások erősségét jellemző Poisson-számok változási tendenciáit. Bár a számszerű egyezés jelenleg még nem kellően pontos, minden bizonnyal levonhatjuk azt a következtetést, hogy egy elasztikus alapanyagba ágyazott helikális kollagén hálózattal, illetve annak jelen modellben feltételezett viszonylag egyszerű tulajdonságaival lényegében megmagyarázhatók az artériák nemlineáris anizotrop tulajdonságai. A szerkezeti modell ezen kívül adatokat szolgáltat a kollagén helix várható szögére és a teherviselő kollagén rostok eloszlására, melyekre vonatkozóan jelenleg nincsenek és mérés technikai problémák miatt nem is lehetnek közvetlen mérési adataink. A mérési adatokhoz való pontosabb illesztés érdekében a rostok szög szerinti eloszlása és a kezdeti anizotropia figyelembevételével kell a modellt a jövőben tökéletesíteni.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

A szerzők köszönetüket fejezik ki Dr. Kovách Arisztid egyetemi tanárnak támogatásáért és értékes tanácsaiért. Köszönet illeti Szutrély Judit fizikust, a Semmelweis OTE Számítástechnikai Csoportjának volt tudományos munkatársát a számítógépi munkában nyújtott nagyfokú segítségéért. Juhász Kálmánnénak és Deczky Magdolnának a mérések elvégzésével kapcsolatos asszisztensi munkát, Dr. Molnár Ferencnének az ábrák megrajzolását köszönik.

IRODALOM

1. Azuma, T., Hasegawa, M., A rheological approach to the architecture of arterial walls. Jap. J. Physiol. 21, 27—47, 1971.
2. Bader, H., The anatomy and physiology of the vascular wall. In: "Handbook of Physiology" Sec. II., Circulation 2., pp. 865—889, Am. Physiol. Soc., Washington D. C. 1963.

3. *Bergel, D. H.*, "The visco-elastic properties of the arterial wall" PhD thesis, Univ. of London. 1960.
4. *Burton, A. C.*, Relation of Structure to function of tissues of wall of blood vessels. *Physiol. Rev.* 34, 619—642, 1954.
5. *Cox, R. H.*, Three-dimensional mechanics of arterial segments in vitro: Methods. *J. Appl. Physiol.* 36, 381—384, 1974.
6. *Cox, R. H.*, Anisotropic properties of the canine carotid artery in vitro. *J. Biomech.* 8, 293—300, 1975.
7. *Gill, P. E., Murray, W.*, Quasi—Newton methods for unconstrained optimization. *J. Inst. Math. Appl.* 9, 91—108, 1972.
8. *Goto, M., Kimoto, Y.*, Hysteresis and stressrelaxation of the blood vessels studied by a universal tensile testing instrument. *Jap. J. Physiol.* 15, 169—184, 1966.
9. *Hartung, C.*, Vascular tissues — a two phase material? In: 7. Wissenschaftliche Konferenz der Gesellschaft Deutscher Naturforscher und Ärzte. Hartman, F. (ed.) pp. 211—220, Springer, Berlin—Heidelberg—New York. 1974.
10. *Hudetz A.*, Kontinuummechanikai módszerek alkalmazása az érfal reológiai tulajdonságainak vizsgálatában. *Mérés és Automatika* 25, 377—382, 1977.
11. *Hudetz A.*, „Az artériák biomechanikai tulajdonságainak vizsgálata”. Orvosi biológiai doktori disszertáció, Budapest. 1979.
12. *Hudetz A., Márk Gy., Kovách A., Monos E.*, Simaizom aktiválás hatása sertés carotis artériák mechanikai tulajdonságaira. *Kísér. Orv. tud.* 1979.
13. *Hudetz A., Monos E.*, Az artéria-fal biomechanikai tulajdonságainak modellezése. *NJSzT* 5. Kollokviuma, Szeged, 275—286, 1975.
14. *Jipp, P., Seifert, K.*, Das konstruktionsprinzip der Aortenmedia, In: Doerr, W.: "Perfusions-theorie der Arteriosklerose" pp. 77—90, Georg Thieme Verlag, Stuttgart. 1963.
15. *Krafka, J. Jr.*, Comparative study of the histophysics of the aorta. *Am. J. Physiol.* 125, 1—14, 1939.
16. *Landau, L. D., Lifšic, E. M.*, „Elméleti fizika VII. Rugalmasságtan”. Tankönyvkiadó, Budapest. 1974.
17. *Lekhnitskii, R. G.*, "Theory of Elasticity of an Anisotropic Elastic Body". Holden-Day, San Francisco. 1963.
18. *Ling, S. C., Chow, C. H.*, The mechanics of corrugated collagen fibrils in arteries. *J. Biomech.* 10, 71—77, 1979.
19. *McDonald, D. A.*, "Blood Flow in Arteries" Edward Arnold, London, 1960.
20. *Middleman, S.*, "Transport Phenomena in the Cardiovascular System". John Wiley and Sons, New York. 1972.
21. *Monos E.*, Hemodinamikai tényezők szerepe az artériás vérkeringés szabályozásai folyamataiban. *Biológia* 26, 47—77, 1972.
22. *Monos E., Cox, R. H., Peterson, L. H.*, Az arteriafal biomechanikai tulajdonságai és a contractio kapcsolata „fiziológiás” mennyiségű noradrenalin és vasopressinnel történő aktivitás esetén. *Kísér. Orv. tud.* 29, 28—39, 1977a.
23. *Monos E., Cox, R. H., Peterson, L. H.*, Fiziológiás dózisú arginin-vasopressin direkt hatása az artéria-falra in vivo. *Kísér. Orv. tud.* 29, 366—374, 1974b.
24. *Monos E., Hudetz A., Cox, R. H.*, Simaizom aktiválás hatása az arteria ilicia és carotis communis inkrementális rugalmassági tulajdonságaira. *Kísér. Orv. tud.* 30, 66—73, 1978.
25. *Nádasy, Gy.*, Személyes közlés. 1978.
26. *Roach, M. R., Burton, A. C.*, The reason for the shape of the distensibility curves of arteries. *Can. J. Biochem. Physiol.* 35, 181—190, 1957.
27. *Spencer, A. J. M.*, Deformations of Fibre-reinforced Materials, Clarendon Press, Oxford. 1972.
28. *Vaishnav, R. N., Young, J. T., Janicki, J. S., Patel, D. J.*, Nonlinear anisotropic elastic properties of the canine aorta, *Biophys. J.* 12, 1008—1027, 1973.
29. *Volinsky, H., Glagov, S.*, 1964 Structural basis for the static mechanical properties of the aortic media. *Circ. Res.* 14, 400—413, 1964.
30. *Volinsky, H., Glagov, S.*, A lamellar unit of aortic medial structure and function in mammals. *Circ. Res.* 20, 99—111, 1967.

PLAZMASZÓRÓ BERENDEZÉSEKHEZ ALKALMAZHATÓ DIAGNOSZTIKAI MÓDSZEREK

GROMA ISTVÁN

ELTE, Általános Fizika Tanszék

1. BEVEZETÉS

Napjainkban a plazmaszórás és a plazmakohászat egyre jelentősebb szerepet játszik. Ennek két oka van. Az egyik az, hogy a kb. 10 ezer K hőmérsékleten a fizikai és kémiai folyamatok általában igen gyorsan végbemennek, vagy esetleg olyan folyamatok is létrejönnek, amelyek a szokásos körülmények között elképzelhetetlenek. A másik szempont, hogy a szükséges energiát villamos energia betáplálásával fedezhetjük, amelynek többek között nagy előnye, hogy a becslések szerint a közeljövőben ez fog legkevesbé drágulni, így a villamos energia felhasználása egyre gazdaságosabbá válik.

A plazmaszórás során lejátszódó fizikai folyamatok jobb megértése érdekében igen fontos egy sor mennyiség ismerete a plazmában [1]. A következőkben ismertetünk néhány eljárást ezen paraméterek megmérésére. A mérési módszereket néhány kivételtől eltekintve nem speciálisan ilyen jellegű problémák megoldására dolgozták ki, így ezek más területekről jól ismertek. Itt csak a mérések elvi alapjait ismertetjük, a mérőberendezések kalibrációs és technikai problémáival nem foglalkozunk.

2. A PLAZMA JELLEMZÉSÉHEZ SZÜKSÉGES MÉRÉSEK

A következőkben először összefoglaljuk, melyek azok a mennyiségek, amelyeknek a mérése feltétlenül szükséges ahhoz, hogy becsléseket tudjunk tenni a plazmagenerátorokban lejátszódó folyamatokra, illetve a plazma por kölcsönhatásra.

a) A plazma hőmérsékletének mérése a hely függvényében

A plazmaszóráshoz használt generátorok esetén a plazmában a gáz hőmérséklete erősen függ a helytől. A láng belső részében eléri 10–20 ezer K-t is, míg a külső részén 400–500 K. Ugyanakkor az egész láng átmérője kb. 1 cm, így csak viszonylag kis tartományokban tekinthető állandónak a hőmérséklet. Ezért a mérőrendszer hely szerinti felbontóképességét ezen feltételek szerint kell meghatározni. Jelentős egyszerűsítést jelent, hogy a lángban a T_r hőmérsékleteloszlás (de ugyanígy más mennyiségek eloszlása is) hengerszimmetrikusnak tekinthető, azaz $T(\mathbf{r})$ független a φ azimut szögtől. Így a feladat a $T(r, z)$ függvény meghatározása.

* Érkezett 1983. szept. 12.

b) *A gáz sűrűségeloszlásának mérése*

A hőmérséklethez hasonlóan a sűrűség is erősen helyfüggő, nem elegendő a láng egy adott pontjában a ρ meghatározása, szükség van a teljes $\rho(r, z)$ függvény ismeretére.

c) *A gázcseppcskék $v(r, z)$ áramlási sebességének mérése*

d) *A beadagolt por mozgásának vizsgálata*

A porrészecskék sűrűsége olyan kicsi, hogy az egyes részecskék sok esetben szabad szemmel is elkülöníthetők. A por tulajdonságaira vonatkozó mérési eljárásokban ezért egyedi részecskéket vizsgálunk.

A plazma por kölcsönhatás vizsgálatánál alapvető fontosságú, hogy a beadagolt por részecske milyen hőmérsékletű, illetve sűrűségű helyeken haladt át és mekkora sebességgel. Ennek ismeretében számolható ki pl., hogy mennyi hőt vett fel, megoldott-e, vagy hogy milyen reakciók rajlottak le benne.

e) *A por felületi hőmérsékletének mérése*

A poron belüli állapotokra szinte egyedüli információt a por felületi hőmérsékletének mérése szolgáltat, így ennek meghatározása nagyon fontos feladat.

Az előzőekben felsorolt mennyiségek mérésén kívül természetesen bizonyos esetekben még más mennyiségek mérése is szükséges lehet, pl. ionizációs fok, elektronhőmérséklet stb. Ezeknek azonban úgy gondoljuk, az egyszerűbb esetekben kisebb jelentőségük van, így nem térünk ki rájuk a következőkben.

2.1. A plazma hőmérsékletének mérése

A következőkben két módszert ismertetünk a hőmérséklet eloszlás mérésére.

1. Hőmérsékletmérés a plazmát alkotó gáz sugárzási intenzitásának mérése alapján [2].

Jól ismert, hogy az atomok vagy molekulák által kibocsátott vonalas spektrumú fény intenzitása

$$I_{nm} = A_{nm} N_n \hbar \omega_{nm}$$

alakban adható meg, ha az átmenet az n -edik energiaszintről az m -edikre történt [3]. A kibocsátott fény körfrekvenciája

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}, \quad E_n > E_m.$$

A_{nm} a spontán emisszió időegységre eső átmeneti valószínűsége és N_n az n -edik állapotban levő részecskék száma.

Tegyük fel, hogy a betöltési szám a Boltzmann-eloszlást követi, az

$$N_n = \frac{N}{z(T)} g_n e^{-\frac{E_n}{kT}}, \quad (1)$$

ahol

$$z = \sum_i g_i e^{-\frac{E_i}{kT}} \quad (2)$$

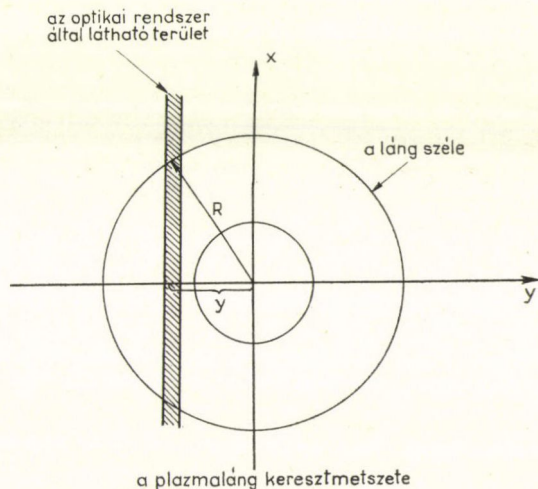
a kanonikus állapotösszeg, E_i az i -edik állapot energiája, g_i a degeneráció foka, T a hőmérséklet, k a Boltzmann állandó és N az összes atomok száma. Ezt felhasználva az egységnyi térfogathból egységnyi idő alatt kisugárzott energia a következő kifejezéssel adható meg:

$$i_n = \frac{1}{4\pi} A_{nm} \hbar \omega_{nm} \frac{g_n}{z} n \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right), \quad (3)$$

ahol n a részecskeszámsűrűség. Ezzei két kiválasztott vonalhoz tartozó fény intenzitásának aránya:

$$\frac{i_1}{i_2} = \frac{A_1 \omega_1 g_1}{A_2 \omega_2 g_2} e^{-\frac{E_1 - E_2}{kT}} = C e^{-\frac{E_1 - E_2}{kT}}. \quad (4)$$

Az i intenzitás mérése nem egyszerű feladat [2], mivel a plazma nem homogén, így i függ a helytől, továbbá sok esetben a plazma belsejéből kiinduló fény abszorpciójától sem tekinthetünk el. Ezért egy olyan optikai rendszert alkalmazunk, amelyen keresztül a detektor csak egy a z tengelyre merőleges keskeny nyalábot lát a plazmából



1. ábra. A plazmasugárzásának felhasználásával történő hőmérsékletmérés elvi vázlata

(1. ábra). Először tekintsünk el az abszorpciótól. Ekkor a detektorba jutó fény intenzitása

$$I(y) = \int_{-\sqrt{R^2-y^2}}^{\sqrt{R^2-y^2}} i(r) dx = 2 \int_0^R \frac{i(r) dr}{\sqrt{r^2-y^2}}, \quad (5)$$

ahol R a plazmaláng sugara, y pedig a nyaláb távolsága a z tengelytől. Ha y -t változtatjuk $O-R$ -ig $I(y)$ ismeretében $i(r)$ meghatározható. Ugyanis, ha (5)-re alkalmazzuk az ún. Abel-inverziót, akkor az intenzitásra

$$i(r) = -\frac{1}{\pi} \int_r^R \frac{dI(y)}{dy} \frac{dy}{\sqrt{y^2-r^2}} \quad (6)$$

adódik.

Ha az abszorpciótól nem tekinthetünk el, akkor (5):

$$I(y) = \int_{-\sqrt{R^2-y^2}}^{\sqrt{R^2-y^2}} i(r) \exp\left(-\int_x^{\sqrt{R^2-y^2}} K(x', \omega) dx'\right) dx, \quad (7)$$

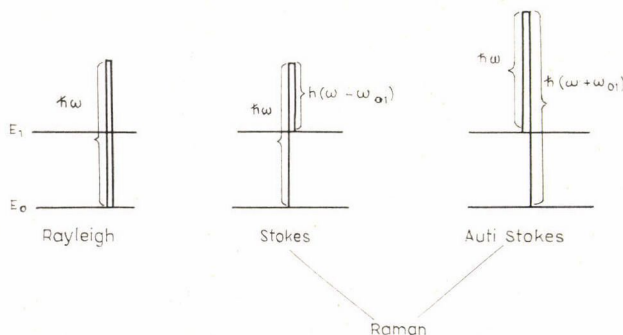
ahol $K(r, \omega)$ az abszorpciók együtthatója, amely esetünkben függ a helytől és a körfrekvenciától. Ekkor $i(r)$ kiszámítása sokkal bonyolultabb. Általában a K függvényt is valamilyen méréssel lehet meghatározni. Ennek részleteivel itt nem foglalkozunk.

2. Hőmérsékletmérés az atomok Raman-szórásának felhasználásával [4], [5].

Tekintsük egy atom vagy molekula két energianívóját. A hozzájuk tartozó energiák legyenek E_0 és E_1 . Vezessük be az

$$\omega_{01} = \frac{E_1 - E_0}{\hbar} \quad (E_1 > E_0)$$

jelölést. Világítsuk meg ezt az atomot $\omega > \omega_{01}$ körfrekvenciájú fénnel. A fotonok ekkor rugalmas és rugalmatlan szórás szenvedhetnek (2. ábra). A rugalmas szórás az ún. Rayleigh, a rugalmatlan a Raman-szórás, amint ez jól ismert. Ha a fény hatására az atom E_0 az $E_1 > E_0$ energiájú állapotba kerül, beszélünk a Stokes-komponensről. Ekkor a kibocsátott foton energiája $\hbar(\omega - \omega_{01})$. Ha E_1 -ről E_0 energiájú állapotba kerül az atom, anti Stokes komponensről beszélünk. Ekkor a foton energiája $\hbar(\omega + \omega_{01})$.



2. ábra. A Reyleigh- és a Raman-szóráshoz tartozó átmenetek

A szórt fény intenzitása Raman-szórás esetén [6]:

$$\begin{aligned} I_S &= C_S(\omega - \omega_{01})^4 N_0 I_i \quad (\text{Stokes-komp.}) \\ I_A &= C_A(\omega + \omega_{01})^4 N_1 I_i \quad (\text{Anti Stokes-komp.}) \end{aligned} \quad (8a)$$

ahol I_i a belső fény intenzitása, N_0 , ill. N_1 az E_0 , ill. E_i energiájú atomok száma, C_s és C_a az atomra jellemző állandók. Termodinamikai egyensúlyban $N_{0,1}$ az előzőkhez hasonlóan az (1) egyenletből határozható meg. Itt is bevezetve az n részecske-számsűrűséget, a térfogategységből szóródó fény intenzitása

$$\begin{aligned} i_s &= c_s(\omega - \omega_{01})^4 n \frac{g_0}{z} e^{-\frac{E_0}{kT}} I_i \\ i_A &= c_A(\omega + \omega_{01})^4 n \frac{g_1}{z} e^{-\frac{E_1}{kT}} I_i. \end{aligned}$$

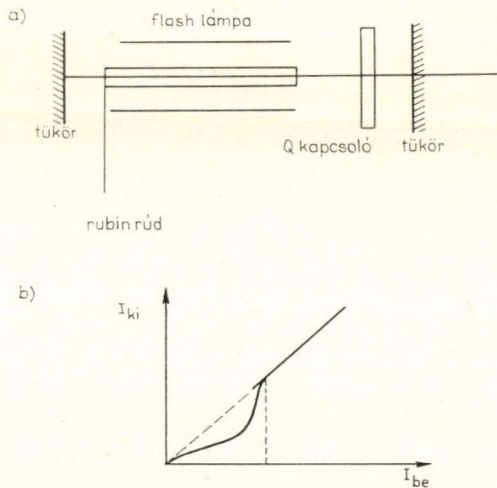
Képezve a két intenzitás hányadosát

$$A = \frac{i_s}{i_A} = \left(\frac{\omega - \omega_{01}}{\omega + \omega_{01}} \right)^4 \frac{C_s g_0}{C_A g_1} e^{-\frac{\omega_{01} \hbar}{kT}}, \quad (9)$$

ami az ismert állandókon kívül csak a hőmérsékletet tartalmazza, így A ismeretében T meghatározható.

A Raman-szórás hatáskeresztmetszete kicsi, valamint a plazmában a gáz sűrűsége is igen kicsi, ezért ahhoz, hogy mérhető jelet kapjunk, I -nek nagynak kell lennie. Ezért fényforrásként ún. Q kapcsolt szilárdtest rubin lézert használunk. Egy ilyen lézer sémája látható a 3. ábrán. Ez a lézer ns-os fényimpulzusokat szolgáltat, de a maximális teljesítmény az impulzusban MW nagyságrendű.

Egy Raman-szórással történő plazmahőmérséklet-mérő rendszer látható a 4. ábrán.



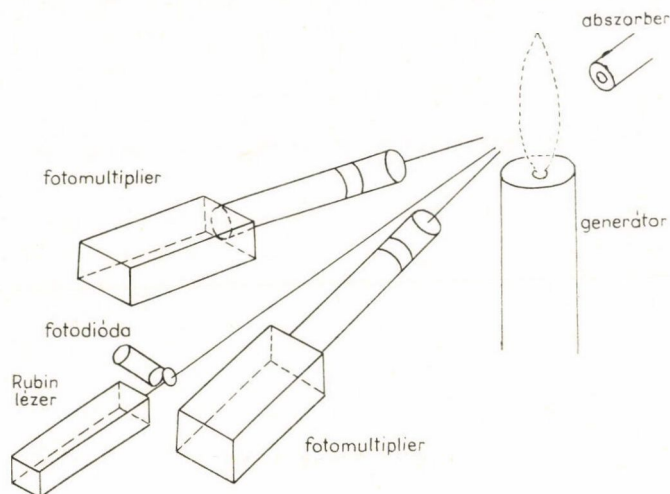
3. ábra. a) Q kapcsolt rubin lézer sematikus rajza
b) A Q kapcsoló transzmissziós karakterisztikája

Az előző hőmérsékletmérési módszerhez hasonlóan a kapott fény itt sem a plazma egy pontjából indul ki, hanem arról a területről, amit a lézernyaláb kimetsz a plazmából. A lokális szórt fény $i(r)$ intenzitásának mérése ugyanolyan elven történhet, mint az előző esetben, tehát a nyalábbal végigpásztázunk az y tengely mentén (1. ábra). A mért interzítás most:

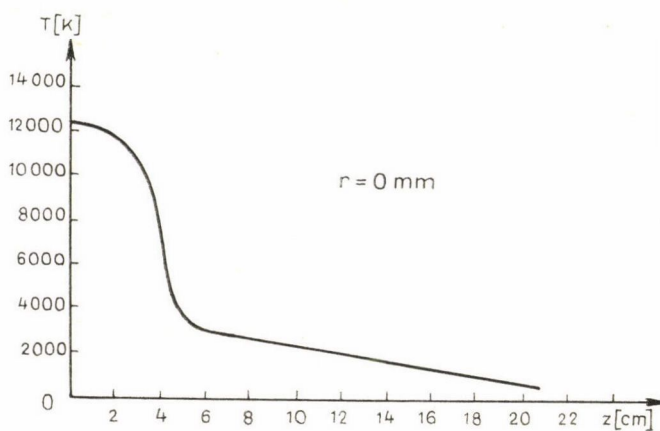
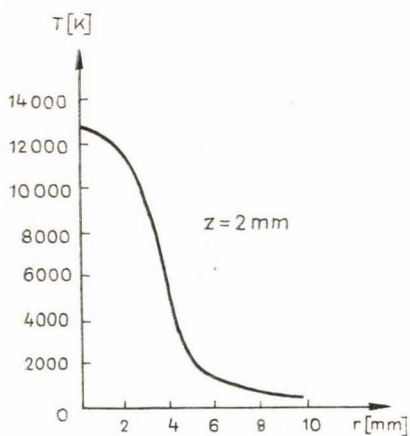
$$I_{s,A} = 2 \int_0^{\sqrt{R^2 - y^2}} i_{s,A}(r) dx$$

amiből $i_{s,A}$ kiszámítása ugyanúgy történik, mint az előzőekben.

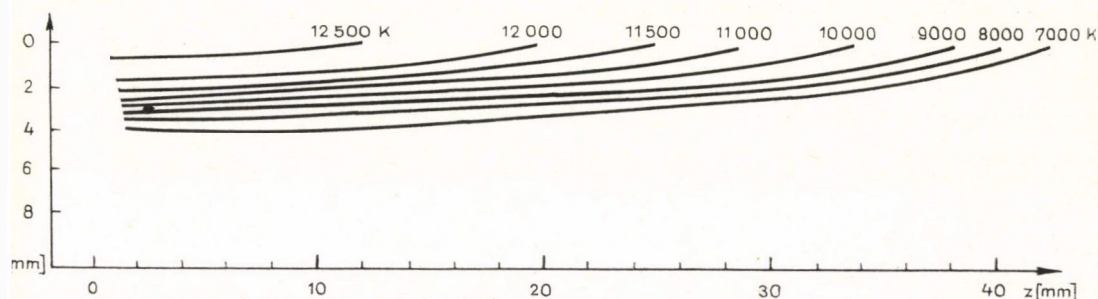
Egy szokásos generátor esetén ilyen módszerrel felvett hőmérsékleteloszlás látható az 5. ábrán.



4. ábra. Raman-szórással történő plazmahőmérséklet-mérő rendszer



5. ábra



5. ábra. Hőmérsékletelosztás egy tipikus generátor által létrehozott lángban

2.2. A gáz sűrűségének mérése

Az előzőekben láttuk, hogy mind a plazma emissziójából adódó fény intenzitása, mind a Raman-szórásból adódó fény intenzitása arányos a részecskeszámsűrűséggel. Tehát mindkét esetben

$$i(r) = A \frac{g}{Z(T)} e^{-\frac{E}{kT}} n(r)$$

alakban írható fel, ahol A ismertnek tekinthető állandó. Ha $i(r)$ ismert és $T(r)$ ismert $n(r)$ egyszerűen kiszámítható. Problémát jelent azonban a $Z(T)$ állapotösszeg, amely függ a hőmérséklettől. Azonban még $10^4 \text{ K} \sim 1 \text{ eV}$ -es hőmérsékleten is elegendő az összeg első néhány tagját figyelembe venni [7], így

$$Z(T) = \sum_0^l g_i e^{-\frac{E_i}{kT}} \quad l \leq 4.$$

Összefoglalva megállapíthatjuk, hogy a plazma sűrűsége a hőmérsékletével egyszerre mérhető, külön mérőberendezést nem igényel.

2.3. A gáz áramlási sebességének mérése

A plazmában a gáz áramlási sebessége $100\text{--}900 \text{ m/s}$ között változik. Ilyen sebességek mérésére két lehetőség kínálkozik.

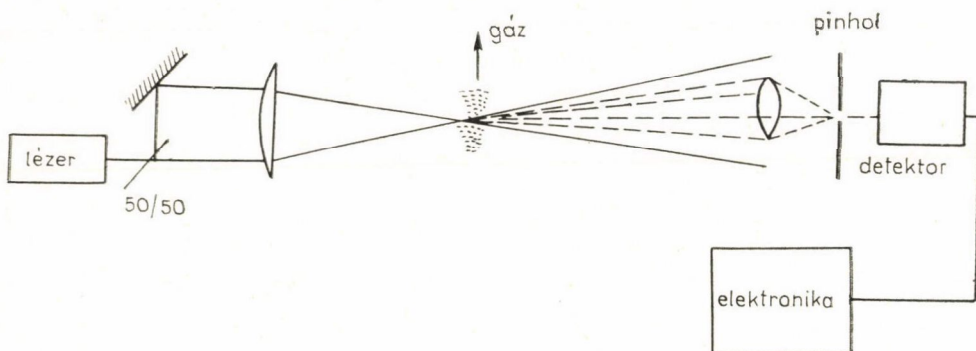
1. Lézer doppleres sebességmérés (LDA) [8]

Ha egy \mathbf{v} sebességgel mozgó testet ω körfrekvenciájú fénnyel megvilágítunk a \mathbf{n} irányból és a szórt fényt az \mathbf{n}_f irányból figyeljük meg (\mathbf{n}_i , \mathbf{n}_f az adott irányba mutató egységvektor), akkor

$$\Delta\omega = \frac{\frac{\omega}{c} (\mathbf{n}_f - \mathbf{n}_i) \mathbf{v}}{1 - \frac{\mathbf{n}_f \mathbf{v}}{c}} \sim (\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i) \mathbf{v} \quad (10)$$

$$\left(\mathbf{k}_{i,f} = \frac{\omega}{c} \mathbf{n}_{i,f} \right), \quad \frac{v}{c} \ll 1$$

frekvenciaeltolódást érzékelünk. Így $\Delta\omega$ méréseivel \mathbf{v} -nek az $\mathbf{n}_f - \mathbf{n}_i$ irányú vetülete meghatározható.



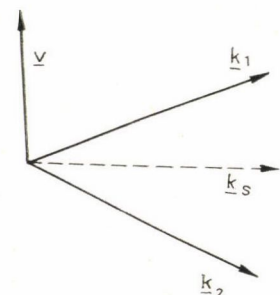
6. ábra. Lézer doppleres sebességmérő rendszer

A plazmadiagnosztikában szokásos egyik mérési elrendezés a 6. ábrán látható. Egy lézernyalábot két párhuzamos nyalábra bontunk, majd a nyalábok egy lencsén megtörve, egy pontban metszik egymást. A két nyaláb hullámszám vektorát jelöljük \mathbf{k}_1 -el és \mathbf{k}_2 -vel (7. ábra). Ekkor \mathbf{k}_s által meghatározott irányban szóródó fényt két komponensből tevődik össze, egy

$$\omega_1 = \omega + \mathbf{v}(\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_1)$$

és egy

$$\omega_2 = \omega + \mathbf{v}(\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_2)$$

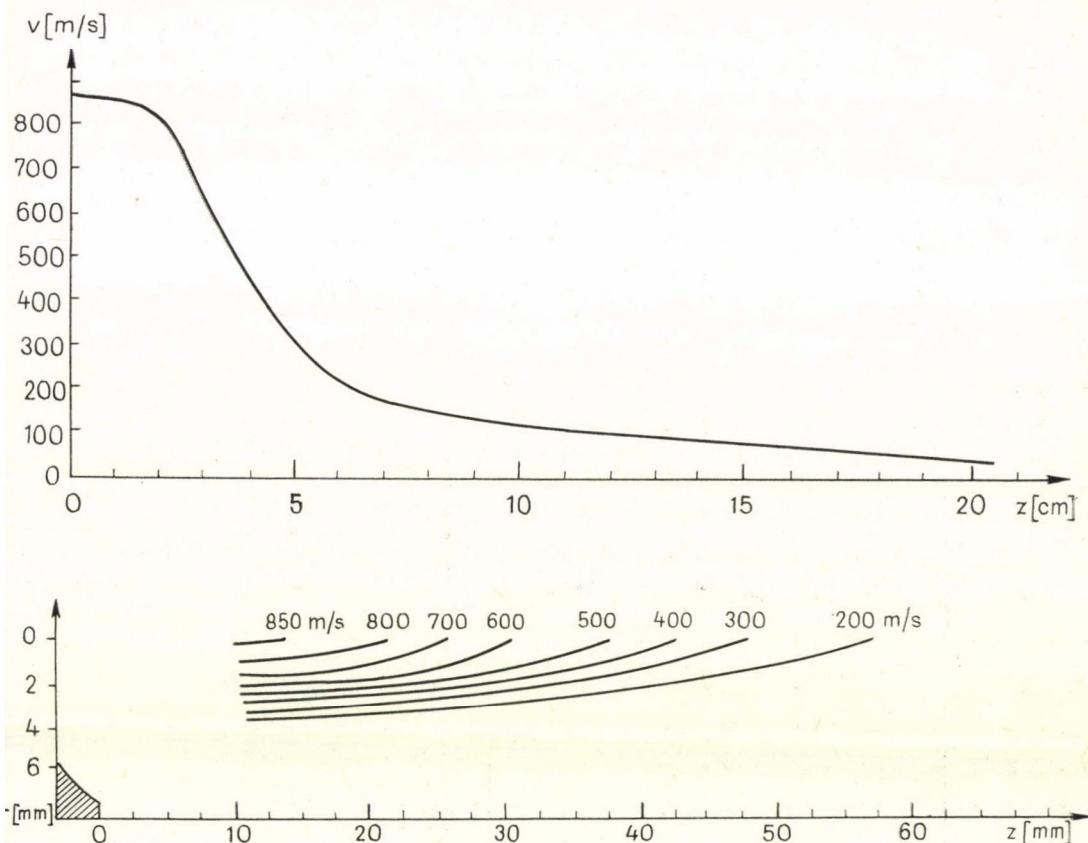


7. ábra. Lézer doppleres sebességmérésnél a fény hullámszámvektorok és a gáz sebességvektorának elhelyezkedése

körfrekvenciájú fényből. A kettő összelebeg. A lebegés frekvenciája $\omega_1 - \omega_2 = (\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \mathbf{v}$ független \mathbf{k}_s -től, így ez minden szórási irányban ugyanaz. Ha a különböző irányokban szóródó fényt egy lencsével összegyűjtjük, majd egy multiplierrel detektáljuk, a detektor jele $\omega_1 - \omega_2$ frekvenciával oszcillálni fog. Megmérve ennek

frekvenciáját, a v sebesség $\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1$ irányú vetülete meghatározható. $\frac{\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1}{|\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1|} \cdot \mathbf{v}$ -t változtatva v is meghatározható.

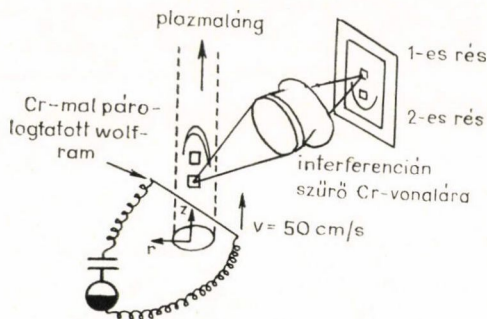
A mérést a plazmában pontról pontra elvégezve $v(r, z)$ kimérhető. Egy tipikus mérési eredmény látható a 8. ábrán.



8. ábra. Gáz sebességeloszlása egy tipikus generátorban

2. Sebességmérés párologtatással

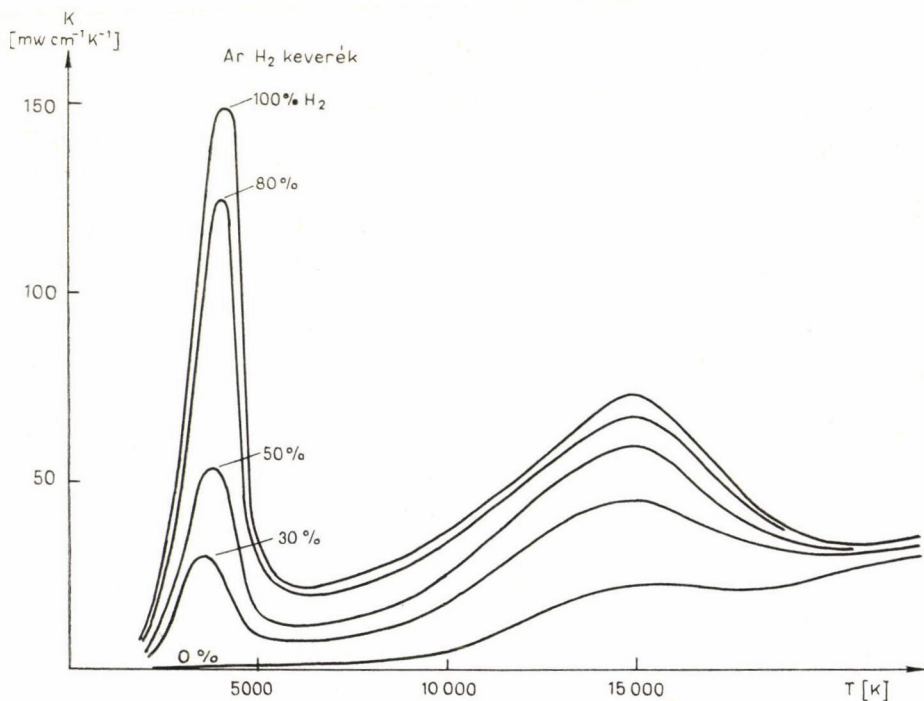
Az eljárás lényege a 9. ábrán látható [2]. Egy vékony wolfram-szálat mozgatunk a plazmán keresztül kb. 50 cm/s-es sebességgel. A szálra előzőleg króm réteget párologtattunk. Egy adott pillanatban egy rövid áramimpulzussal ohmikusán fűtjük a wolfram szálát. Ekkor a króm elpárolog a szál felületéről. Az áramló gáz magával ragadja a Cr-ionokat, így az ionok a gáz lokális sebességével fognak haladni. A sebességük mérhető az ábrán látható kettős rés felhasználásával, ha mindkét rés mögé



9. ábra. Gáz sebességének mérése wolfram-szálról elpárolgó Cr-ionok felhasználásával

egy-egy fotomultipliert helyezünk és egy interferencia szűrővel biztosítjuk, hogy a detektorokba csak a Cr egy meghatározott vonala juthasson el. Ekkor ugyanis mérve a két detektoron kapott jel között eltelt időt, $v(r, t)$ meghatározható.

Itt jegyezzük meg, hogy $T(r, Z)$, $\rho(r, Z)$, $v(r, Z)$ ismeretében a plazma $\eta(T)$ viszkozitása és $K(T)$ hővezetőképessége is meghatározható a hőmérséklet függvé-



10. ábra. $K(T)$ hőmérsékletfüggése Ar és H_2 gáz keverékében

nyében. Ugyanis felírva a Navier—Stokes és a hővezetési egyenletet

$$\varrho \frac{d}{dt} \left(\frac{v^2}{2} + \varepsilon \right) = -\operatorname{div} (\varrho \mathbf{v} p - K \nabla T - \mathbf{v} \boldsymbol{\sigma}'),$$

$$\varrho \frac{d}{dt} \mathbf{v} = -\operatorname{grad} p - \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}',$$

ahol

$$\sigma'_{ik} = \eta \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial v_l}{\partial x_l} \delta_{ik} \right),$$

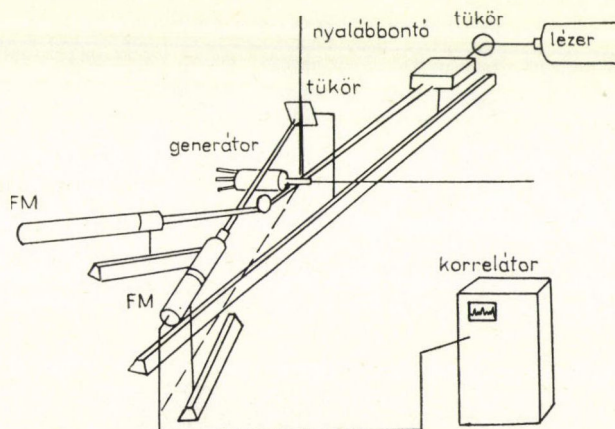
valamint felhasználva ideális gázra érvényes összefüggéseket $p = nkT$ és $\varepsilon = c_v T$, K és η meghatározható. $K(T)$ hőmérsékletfüggése látható a 10. ábrán.

2.4. A porrészecskék sebességének mérése [9]

A por sebességét a következőképpen mérhetjük meg. Ha két egymással szöget bezáró koherens fénynyaláb találkozik, az interferencia következtében sötét és világos csíkok alakulnak ki. A csíkok távolsága

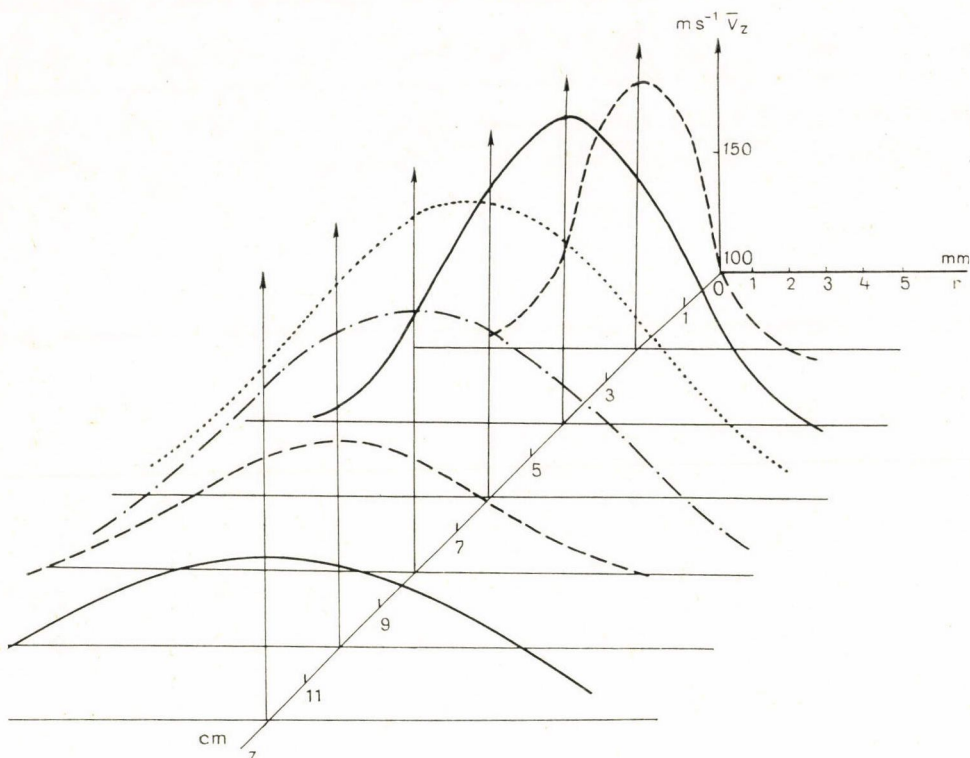
$$d = \frac{\lambda}{2} \sin \frac{\Theta}{2}.$$

Ha ezen a csíkrendszeren egy \mathbf{v} sebességgel mozgó test halad keresztül a róla szóródó fény intenzitása az idő függvényében maximumokat fog mutatni, annak megfelelően, hogy a test az adott pillanatban milyen intenzitású helyen tartózkodik. Két maximum között eltelt idő $t = \frac{d}{v_n}$, ahol v_n a \mathbf{v} vektor csíkokra merőleges komponense, így t méréssel v_n meghatározható. Változtatva a csíkok és a sebesség közötti szöget, valamint a két fénynyaláb metszéspontjának helyzetét a plazmában, $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ meghatározható.



11. ábra. A por sebességét mérő rendszer vázlata

Fényforrásként lézert kell használni, mivel csak ezzel biztosítható a megfelelő intenzitás. A mérési elrendezés a 11. ábrán látható. A mérésben az erős véletlen háttér két egymásra merőleges irányban elhelyezkedő detektort kell alkalmazni, és az oszcilloszkópon csak akkor jelenik meg a jel, ha a két detektor jele koincidenenciában van. Egy tipikus mérési eredményt mutat a 12. ábra.



12. ábra. Porrészecskék sebességeloszlása egy tipikus generátorban

2.5. A porrészecskék fluxusának mérése [9]

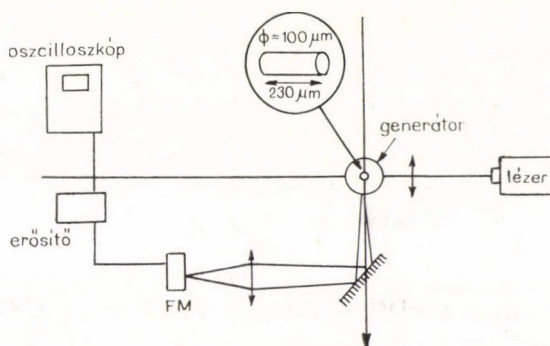
A porrészecskék fluxusa, azaz az egységnyi felületen időegység alatt áthaladó részecskék száma

$$\Phi(\mathbf{r}) = n\mathbf{v}(\mathbf{r})n,$$

ahol $n(\mathbf{r})$ a porrészecskék száma egységnyi térfogatban, \mathbf{n} az adott felület normális egységvektora.

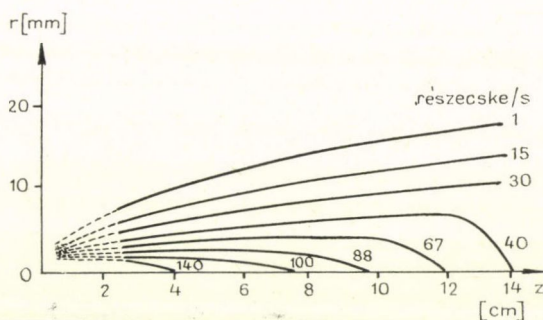
$\Phi(\mathbf{r})$ mérésével $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ ismeretében $n(\mathbf{r})$ meghatározható, amely nagyon fontos paraméter.

$\Phi(\mathbf{r})$ mérésére a 13. ábrán látható mérési elrendezés használható. Egy lézernyalábot lencsével fókuszolunk. Ha egy porrészecske áthalad a fókuszpont körüli kis



13. ábra. A porrészecskék fluxusát mérő rendszer sematikus rajza

tartományon, a detektor egy fényfelvillanást érzékel. Ezen tartományon kívül haladó részecskék esetében a szórt fény intenzitása már kisebb az érzékelhetőnél. A tartomány hengernek tekinthető, méreteit az optikai rendszer határozza meg. Ha ezután mérjük az időegységenkénti felvillanások számait, $\Phi(\mathbf{r})$ meghatározható. Egy mérési eredmény látható a 14. ábrán.



14. ábra. A porrészecskék fluxusa egy tipikus generátorban

2.6. A por felületi hőmérsékletének mérése

A por felületi hőmérsékletének mérésére B. Kruszeusa és I. Lesinski dolgozta ki a következő módszert [10].

Az anyagok emisszió képessége, $E_1(\lambda, T)$ erősen függ a hőmérséklettől. A függvény alakja különböző anyagokra az irodalomból ismert. Ha megmérjük egy (λ_1, λ_2) hullámhossz intervallumban a por által kibocsátott fény intenzitását, azaz az

$$I(T) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} E_1(\lambda, T) d\lambda$$

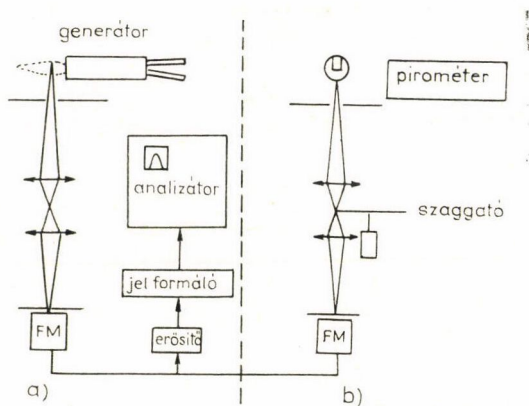
mennyiséget, akkor ennek ismeretében T meghatározható.

A mérési elrendezés a 15a ábrán látható. Amennyiben a detektor által látható területen egy porrészecske halad keresztül, egy fényimpulzust kapunk.

A detektorba jutó fény intenzitásának meghatározásakor nem tekinthetünk el az optikai rendszer hullámhosszfüggő $F(\lambda)$ abszorpciójától, amely kimérhető. Így a detektorba jutó fény teljes intenzitása a detektor által érzékelhető hullámhossztartományban

$$I_1(\lambda) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} E_1(\lambda, T) F(\lambda) d\lambda.$$

Mivel T meghatározásához $I(T)$ ismerete szükséges, a detektort és az erősítő rendszert hitelesíteni kell.



15. ábra.

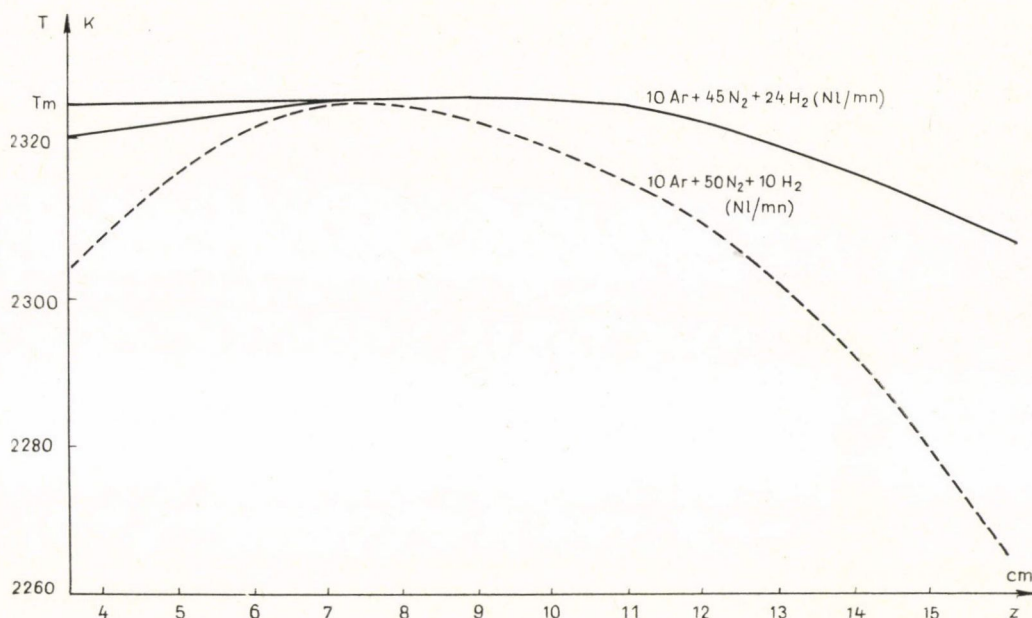
- a) A por felületi hőmérsékletét mérő rendszer vázlata
b) A hozzá tartozó kalibrációs rendszer

A kalibrálás a következőképpen történik (15b ábra). A plazmaláng helyett egy higanygőzlámpát helyezünk el az optikai rendszer elé. A higanygőz hőmérséklete egy pirométerrel mérhető, így $E_2(\lambda, T)$ függvény ismert. Egy szaggató beiktatásával szimulálhatjuk azt, hogy egy porrészecske kerül a detektor által látható területbe, mivel akkor, amikor a szaggató átengedi a fényt — a valódi méréshez hasonlóan — egy fényimpulzus jut a detektorba. A fény intenzitása ekkor

$$I_2(T) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} E_2(\lambda, T) F_\lambda d\lambda.$$

Megmérve a hozzá tartozó elektromos jelet, a rendszer hitelesíthető.

Ha a plazmaláng helyzetét változtatjuk, a por felületi hőmérséklete helyről helyre kimérhető. Így kapott mérési eredmény látható a 16. ábrán.



16. ábra. A por felületi hőmérséklete a z tengely mentén különböző gázkeverék esetén

ÖSSZEFOGLALÁS

Megállapíthatjuk, hogy a plazmaszóró berendezésekben lejátszódó folyamatok szempontjából érdekes paraméterek mérésére kidolgozott módszerek állnak rendelkezésre. Mérhető a plazmaláng hőmérséklet és sűrűségeloszlása, valamint a plazmát alkotó gáz áramlási sebességének eloszlása. Meghatározható továbbá a plazmába bevitt porrészecskék sebessége, fluxusa, felületi hőmérséklete a hely függvényében.

IRODALOM

1. Sárny I., Magyar Fizikai Folyóirat, 32, 1985.
2. W. Lochte—Holtgreven, Plasma diagnostics. ed. W. Lochte et al. North-Holland, Amsterdam, 1968.
3. Marx Gy., Kvantummechanika. Tankönyvkiadó, Budapest, 1971.
4. G. F. Widlofe and S. Lederman, AIAA J. 9, 309, 1971.
5. S. Lederman, I. Bornstein, Acelentan, I. Glassr, Project Squid, Polytechnic Institute of New York, Nr. 098—038, 1974.
6. P. I. Blohincev, A kvantummechanika alapjai. Izd. Nauka, Moszkva 1976.
7. Marik M., Bevezetés a csillagászatba. Tankönyvkiadó, Budapest.
8. F. Durst, A. Melling and J. H. Whitelaw, Principles and Practice of Laser-Doppler Anemometry. Academic Press, New York, 1981.
9. A. Vardelle, M. Vandelle, I. M. Baronnet et D. Fauchais, Rev. int. hautes. Tempér. Refract. 17, 221—233, 1980.
10. B. Kruszevska, S. Lesinski, Rev. phys. appliquée, 12, 1209, 1977.

KÖNYVISMERTETÉS

**Landolt—Börnstein: Numerical Data and Functional Relationships
Science and Technology, New Series, Group III, Volume 12, Part c.
Magnetic and Other Properties of Oxydes and Related Compounds**

A 604 oldal terjedelmű mű két részre oszlik. Az első rész (140 anyag, 32 táblázat, 47 ábra, 46 oldal) M, W, Y, Z, U, kalcium-, X, F és egyéb típusú hexagonális rendszerben kristályosodó ferrittek, pl. $\text{SrFe}_{12}\text{O}_{19}$ -el v. $\text{BaZn}_x\text{Ti}_y\text{Mn}_z\text{Fe}_{12-x-y-z}\text{O}_{19}$ -el kapcsolatos kristálytani, termodinamikai, elasztikus, mágneses, magnetoelasztikus, hiszterézis-, magnetokristályos, nagyfrekvenciás mágneses lényegében 1970 és 1980 között megjelent publikációkból kölcsönzött adatokat foglalja össze. Ennél újabb adatokról az irodalmi utalások jegyzékében található összefoglaló cikkekből kaphatunk tájékoztatást. Az adatok elrendezése olyan, hogy a mű alapját képező III/4a kötettel egyidejűleg használható. Az egyes alfejezeteket nagyterjedelmű táblázatok vezetnek be, amelyek tömören tájékoztatnak az anyagokat jellemző fontosabb tulajdonságokról. Az adatok között szórványosan fázisdiagrammokat, Mössbauer és ESR spektrumokat is találhatunk. E vegyületcsoport elsősorban technikai jelentőségével tűnik ki, amely elsősorban képviselői nagy mágneses anizotrópiájával függ össze. E ferritek alkalmazási területüket illetően elsősorban mint állandó mágnesek jöhetnek számításba, de nem elhanyagolható mikrohullámú elektronikus eszközökben történő felhasználásuk sem.

A könyv második részében ritkaföldfémek (585 anyag, 16 táblázat, 712 ábra, 37 oldal) NaCl , Th_3P_4 , BiF_3 , CaF_2 és egyéb kristálytípusú pniktideire, kalkogenideire és hidrideire vonatkozó adatok gyűjteménye kapott helyet. Az adatokkal kapcsolatban érvényesek az első részben közölt megjegyzések, talán azzal a különbséggel, hogy nagyobb teret szenteltek a termodinamikai és kristálytani adatoknak. Kb. 1/5 arányban vegyes pniktid-kalkogenid anyagok is szerepelnek a kristályok között, pl. $\text{SmSb}_x\text{S}_{1-x}$. E vegyületcsoport jelentősége elsősorban a kutatásokban elfoglalt helyük alapján domborodik ki. Ugyanis segítségükkel lehetőség nyílik azonos kristályszerkezetben az f elektronok számának változásából következő lokalizációs effektusok, az s—f kölcsönhatásokra visszavezethető Kondo-effektus, spinningadozási és vegyérték jelenségek, továbbá a pniktid-kalkogenid arány változtatásával a Fermi-nívó folytonos eltolódása következtében fellépő érdekes és egyedi mágneses jelenségek tanulmányozására. A hidridek elsősorban változó sztöchiometriájukkal tűnnek ki, továbbá igen érdekes módon azzal, hogy a hidrogén ionok pl. a CaF_2 rácsban hajlamosak az intersticiális helyek előnyben részesítésére a rácselyekkel szemben. Az egyes fejezetek elején található bevezetők színvonalasan és jól érthetően foglalják össze a mágneses jelenségeket érintő fizikai fogalmakat és egységeket, különös gondot fordítva a CGS—SI konverzióra. Az egyes fejezetek végén kiterjedt irodalomjegyzék könnyíti meg a használó tájékozódását. Ugyanezt a célt szolgálja a 220 oldal terjedelmű index is, amely a III/4 forrásműben található anyagokat is tartalmazza.

Úgy gondolom, hogy az elmondottak alapján felesleges különösebben ecsetelni a mű technikai és tudományos jelentőségét. Biztos vagyok abban, hogy könyvtáraink hasznos és megbecsült, gyakran forgatott darabjaként fogja megkezdeni pályafutását.

R. K.

**Landolt—Börnstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology,
New Series, Group III, Volume 17: Semiconductors, Subvolume e:
Physics of Non-Tetrahedrally Bonded Elements and Binary Compounds I.
Springer-Verlag, Berlin etc. 1983.**

A mű a félvezetők tárgyaló sorozat ötödik kötete. Míg az eddig megjelent kötetek (a—d) a tetraéderesen kötött félvezetőkkel, továbbá SiC, SiGe és tetraéderes III—V, ill. II—VI típusú félvezetőkkel kapcsolatos adatokat tartalmazzák, e kötet a nem tetraéderesen kötött félvezető elemek és az I és II oszlop elemeivel alkotott binér félvezető vegyületek adatait öleli fel.

Az összesen 1095 oldal terjedelmű kétkötetes mű két részre oszlik. A három fejezet terjedelmű első rész (238 oldal, 430 ábra) egyes alfejezeteiben B, P, As, Sb, Bi, S, Se, Te különböző módosulataira vonatkozó adatok kaptak helyet. A tárgyalt anyagok között szilárd oldatok is szerepelnek, pl. $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$. A legbővebben tárgyalt anyagok a B és Se, a legkevesebb adat a P-nél található.

A hat fejezetet felölölő második rész 1A—1B (CsAu , 2), I_x — I_y (Na_2KSb , 20), I_x — VI_y (Cu_2O , 10), II_x — V_y (Cd_3As_2 , 25), II_x — IV_y (Mg_2Sn , 13), II — VII_2 (HgI_2 , 6) félvezető vegyületekkel kapcsolatos adatok gyűjteményét tartalmazza. A zárójelben levő képlet az illető vegyületcsoport legnagyobb terjedelemben képviselt tagja, míg az ezt követő szám a tárgyalt vegyületek száma.

A hét fejezetből álló harmadik rész (562 oldal, 1096 ábra, egyúttal a II. kötet teljes tartalma) nem tetraéderes III—VI (GaSe , 9, 7 szilárd oldat pl. $\text{Ti}_{2-x}\text{InSe}_2$, 12 terner vegyület ill. ezekkel képzett szilárd oldat, pl. $\text{TiGa}_x\text{In}_{1-x}\text{S}_2$), III—VII (TiCl_2 , 4, 2 szilárd oldat pl. $\text{TiCl}_x\text{Br}_{1-x}$), IV_x — VI_y (PbTe , 19, 7 szilárd oldat pl. $\text{SnS}_{1-x}\text{Se}_x$ és 3 terner vegyület pl. $\text{SnS}_{1-x}\text{Se}_x$) IV — VII_2 (PbI_2 , 4), V_x — VI_y (As_2S_3 , 13, 4 szilárd oldat pl. $\text{Sb}_x\text{Bi}_{1-x/2}\text{Se}_y\text{Te}_{1-y/3}$) és végül V — VII_3 (SbI_3) típusú félvezető vegyületek adatainak gyűjteménye.

Néhány esetben az egyes fejezetek előtt az anyagcsoportok egyes tagjai szerkezetét összehasonlító rövid bevezető fejezet is helyet kapott. Az ábrák az adatoktól külön választva a kötetek külön részében találhatók, egyébként a tárgyalásnak megfelelő sorrendben. Az irodalmi utalásokat a fejezetek vagy az alfejezetek végén találhatjuk. Az adatok tárgykör szerinti felosztása a következő: rács-szerkezet, elektronikus, rács, transzport, optikai és egyéb tulajdonságok, pl. tiltott sáv szélesség, pályenergia diszperziós görbék, sávközötti átmenetek, exciton energiaszintek, akceptor és donor-nívók, abszorpciós és hőmérsékletfüggése, hővezetőképesség, Debye hőmérséklet, elektromos vezetőképesség, Hall mozgékonyág, hőkapacitás, fázisátalakulási jellemzők, sűrűség, entrópiáfüggvény, törésmutató, dielektromos és mágneses szuszceptibilitás, fázisillesztés szöge, optikai forgatóképesség, hőkitérjedési együttható, Grüneisen paraméter, foton diszperziós görbék, rugalmassági modulus, piezoelektromos együttható stb. Az egyes adatok mellett közli a mérési körülményeket, vagy számított értékek esetén a számítási módszert is.

Annak ellenére, hogy a szerzők az irodalmat kritikus szemmel tekintették át, az olvasó gyakran ütközik egyazon tulajdonságra vonatkozó különböző számértékű adatokba. Ez az elkerülhetetlen tény azt tükrözi, hogy a szerzők kritikai tevékenysége csupán véges mértékben lehet objektív. A legmegbízhatóbb adatok kiválasztása azonban általában nem ütközik különösebb nehézségbe, ti. ilyen esetekben a szerzők az egymás mellé helyezés jól bevált szokását követve az irodalmi források, módszerek és körülmények pontos felsorolásával az olvasóra bízák a döntést. A kiadással kapcsolatos munka minőségét nem lehet eléggé értékelni. A kötet a sorozat legjobb hagyományait követve az adatokat könnyen hozzáférhető tetszetős formában tárja az olvasó elé.

R. K.

Landolt—Börnstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, New Series, Group II, Volume 14, Subvolume b: Molecular Constants
Springer-Verlag, Berlin etc., 1983.

A mű a sorozat II/6 kötetének első és II/4 kötetének második pótkötetként megjelent II/14 kötet második és egyúttal befejező alkötete. Erre a kiegészítésre az utóbbi időben megvizsgált molekulák nagy száma és a mérési módszerek, különösképpen a mikrohullámú, molekulásugár és elektronrezonancia mérési technikák területén tapasztalható erőteljes fejlődés miatt volt szükség. Az említett négy kötet klasszikus és modern spektroszkópiai mérésekkel nyert és kritikailag kiértékelt molekuláris adatok teljességre törekvő gyűjteménye, amely az 1982-ig bezárólag megjelent eredményeket tartalmazza.

Míg a 772 oldal terjedelmű a) alkötet zárthéjú molekulákkal foglalkozik, és a b) alkötet első fejezet is az előző alkötetben tárgyalt bonyolultabb térszerkezetű molekulák szerkezeti ábráit és atomjainak indexelési rendszerét tartalmazza (24 o., 196 ábra) a b) alkötet második, mondhatjuk fő fejezetében kétatomos (146 o.) és többatomos (117 o.) szabad gyökök adatairól nyerhetünk felvilágosítást. Az egyes gyökök esetében szép számmal találhatunk izotópokat is. A kétatomos gyökök esetében az egyes alfejezetek tartalmát elektronállapotuk, míg a többatomos gyököknél linearitásuk és atomszámuk dönti el. A negyedik fejezet (20 o.) a 14 a) kötet adatainak mérési módszerek alapján történő kiegészítése.

A kötetet 62 oldal terjedelmű anyagindex zárja. A mű ezen igen értékes része a II/4, II/6 és a II/14 a) és b) kötetekben tárgyalt anyagok tartalomjegyzéke. A hierarchia: alfabétikus sorrend (1.) és atomszám (2.).

A közölt adatok fő tömege a rezgési-forgási átmenetek frekvenciáit és az egyes rezgési állapotok dipólusmomentumait öleli fel, azonban számos esetben tehetetlenségi hiányok, 4,6 v. 8-ad rendű centrifugális torzítási konstansok, spin-spin dipoláris, normál és redukált spin forgási kölcsönhatási, mágneses hiperfinom dipoláris, mágnektromos kvadrupoláris paraméterek, a spin és forgási g tenzorok főkomponensei, az atomtávolságok és kötésszögek effektív, alapállapotú, helyettesítési és egyensúlyi értékei, a páratlan elektronok mágniál vett sűrűségei, és $1/r^3$, ill. $1-3\cos^2/\theta^3$ operátorokkal képzett várható értékei is szerepelnek az egyes molekulák, ill. gyökök adatai között. Az adatok szemléletes és tetszetős táblázatokban kaptak helyet, melyeket az irodalmi utalások nyomban követnek. A fejezeteket rövid bevezető nyitja, amelyben a definíciók és jelölések az eddigiekben megszokott pontos és áttekinthető módon jelennek meg.

A szerkesztésben résztvevő szerzők, elsősorban az Ulmi Egyetem Struktúradokumentációs Szektora gondos és minden részletre kiterjedő munkája nagy mértékben hozzájárult ahhoz, hogy ismét e sorozat egy kiváló képviselőjét tarthattuk kezünkben, melynek tudományos és technikai értéke szinte felbecsülhetetlenül magas. Külön dicsőítet illeti a Springer kiadót, aki e művet is, a sorozat többi köteteivel egyetemben, külső pénzügyi támogatás nélkül jelentette meg.

R. K.

**Landolt—Börnstein: Numerical Data and Relationships in Science and Technology
Group II: Atomic and Molecular Physics, Volume 13: Radical Reaction Rates in Liquids,
Subvolume c: Radicals Centered on N, S, P and Other Heteroatoms Nitroxyls
Springer-Verlag, Berlin, 1983**

A mű tulajdonképpen a szabad gyökök mágneses tulajdonságaival foglalkozó II/1 és II/9 kötetek szerkesztéséig terjedő folytatásaként megjelent, öt alkötet terjedelműre tervezett II/13 kötet harmadik alkötete. A kötet ilyen felosztására a folyadékokban végbeművő gyökök reakciók tárgykörében megjelent publikációk igen magas száma miatt volt szükség. Míg az a) és b) alkötetek szénatomokon centrál gyökökkel, az ezután megjelenő d) és e) alkötetek oxo és peroxi gyökökkel, jelen alkötet N, S, P és egyéb atomokon centrál gyökökkel, továbbá nitroxilgyökökkel foglalkozik.

A 339 oldal terjedelmű kötet elsősorban dimarizációk, különböző gyökök közötti reakciók, unimolekuláris reakciók (ezen belül intamolekuláris telítetlen kötések igénybevévő reakciók), H-elvonással járó és egyéb molekulák közötti reakciók sebességi állandóinak gyűjteménye. A definíciókkal és egyéb tudnivalókkal foglalkozó rövid bevezető után következő három fejezet képezi a mű fő tartalmi részét. Az első fejezetben (160 o.) aminil, aminum, imidil, iminil, hidrazil, verdenil, diazirinil, di- és triazenil gyökök, a másodikban (145 o.) aminoxil, továbbá iminoxil és thilil gyökök, végül a harmadik fejezetben (67 o.) B, Si, P, S, Ge, As, Sn és Hg atomokon centrál gyökök adatai kaptak helyet.

Az egyes gyökök esetében a gyökkeltés mechanizmusát (villanó fotolízis, impulzus radiolízis, termikus bomlás, elektrokémiai akciók stb.) és az ezzel kapcsolatos kémiai egyenleteket, az oldószer összetételét, a mérési módszert (kinetikus és stacioner UV-látható, NMR, ESR spektroszkópia, ESR, NMR vonalanalízis, CIDNP, vezetéképesség, kromatográfia, csapda, lumineszcencia, termopár), a mérés körülményeit és a mérési adatokat adják meg. Utóbbiak elsősorban a sebességi állandók, azonban sok esetben egyensúlyi állandókkal, redoxpotenciálokkal, sugárkémiai kihozatalokkal, Hammett-függvényekkel, láncvégződési sebességi állandókkal, aktivációs entalpiákkal, entrópiákkal és térfogatokkal, disszociációs entalpiákkal és entrópiákkal, és élettartamokkal kapcsolatos adatok is megjelennek rövidített irodalmi hivatkozások kíséretében. Utóbbiak részletes jegyzéke az egyes fejezetek végén található, amely az 1982-ig bezárólag megjelent közleményeket tartalmazza. A kötetben anyagindex nem található. Számos esetben találhatunk adatokat a sebességi állandó pH, hőmérséklet- és oldószerfüggésére továbbá bimolekuláris reakciók esetén a partner minőségétől való függésre.

A téma fontosságát jelzi, hogy e viszonylag szűkreszabott anyagi körből egy kötet terjedelmű anyagot lehetett összegyűjteni. Ezt az is mutatja, hogy a publikációk mintegy kétharmada 1975 után jelent meg. Ez is bizonyítja, hogy a reaktív kémiai közbeeső termékek szerkezetének, képződési és lebomlási módjainak tanulmányozása jelenleg hatalmas fejlődésen megy keresztül. Ennek elsődleges oka a téma többrétű hasznosíthatóságában rejlik, ti. a gyökök reakciómechanizmusok mélyebb ismerete nagymértékben elősegítheti a gerjesztett állapot tudatos igénybevévételén alapuló új és hatékony kémiai technológiák kifejlesztését, közelebb vihet egyes alapvető életfolyamatok, foto- és sugárkémiai folyamatok megértéséhez, továbbá alaputatási szinten hozzásegíthet a kémiai reakció fogalomkörébe tartozó, a kémiai tudományok lényegét érintő kérdések megoldásához. A fentiek alapján nyilvánvaló, hogy a kötet értékes információkat elsősorban a kémiai tudomány és technológia szinte valamennyi területén tevékenykedő szakember számára nyújt.

R. K.

**Landolt—Börnstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology
Group III Vol. 17. Semiconductors, Subvolume C
Technology of Si, Ge and SiC
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York—Tokyo, 1984**

A jól ismert és sokat forgatott Landolt—Börnstein új sorozat egy további kötettel bővült, amely a mikroelektronikai forradalomban oly fontos szerepet játszó félvezetők, nevezetesen a Si, Ge és SiC adataival foglalkozik. Mivel a kötet technológiai jellegű, nem annyira a számoszlopok dominálnak, mint inkább a technológiai szempontból fontos leírások rajzok és grafikonok kíséretében, valamint irodalmi utalások. A kötet kiadói M. Schulz és a munka közben meghalt H. Weiss igyekeztek a hatalmas adatmennyiséget logikus sorba állítani, ahogy az a gyakorlati technológiai láncban egymás után következik.

Anyaganként a következő sort választották.

1. *Technológiai adatok* mint fázisdiagramok, gőznyomások, oldékonyságok, diffúziós állandók, megoszlási tényezők, vizkozitás, felületi feszültség stb.
2. *Kristálynövesztés* ezen belül szintetizálás, tisztítás, zóna olvasztás, növesztő módszerek, öntecs készítés stb.
3. *A kristályok minősítése* ezen belül adalék profilok, szennyezők, rácshibák, felületi tulajdonságok, ellenőrző módszerek stb.
4. *Eszköz technológia* ezen belül alapvető eszköz struktúrák, diffúzió, ion implantáció, epitaxia, rétegelőállítás, elektródozás, litográfia, maratási folyamatok, eszköz készítés stb.

A kötet elején a használt jelölésekről és egységekről készült táblázat, egységszámítási táblázat és az oly gyakran használt szövegdő betűkből alkotott betűszavak 6 oldalas felsorolása szerepel.

A kiadónak nem volt könnyű dolguk, hiszen a félvezetők területe erőteljesen fejlődésben levő terület, ezért egyre újabb és újabb adatok látnak napvilágot. Ezen csak úgy lehet úrrá lenni, ha időközönként újabb és újabb kötetek látnak napvilágot. Rövidesen megjelenik a III/17d kötet, amely a többi félvezető anyaggal foglalkozik, amely anyagok a jövő mikroelektronikája szempontjából fontosak emellett, hogy a Si sokáig vezető lesz a félvezetők között.

A kitűnő kötetet hasznosan forgathatják a kristálynövesztés, minősítés, mikroelektronikai kutatás és fejlesztés területén dolgozó szakemberek.

V. R.

**A. A. Csernov et. al.: Modern Crystallography III. Crystal Growth.
Springer Series in Solid State Sciences 36.
Springer-Verlag, 1984**

Az eredeti művet a Nauka Kiadó (Moszkva) jelentette meg 1980-ban Szovremennaja krisztallografija; Obrazovanie krisztallov címen. A Springer Kiadó sorozatában szerepel a Modern Crystallography másik három kötete is nevezetesen,

15. B. K. Vainshtein Modern Crystallography I. Symmetry of Crystals. Methods of Structural Crystallography 1981.
21. B. K. Vainshtein, V. M. Fridkin, V. L. Indenbom Modern Crystallography II. Structure of Crystals 1982.
37. L. A. Shuvalov et al.
Modern Crystallography IV.
Physical properties of Crystals (Megjelenés alatt)

A négy kötet együttesen öleli fel a korszerű krisztallográfia alapjait.

A III. kötet két részből áll. Az I. rész, amelyet A. A. Chernov írt, a kristályosodási folyamatokat tárgyalja hét fejezetben. Az első fejezet az egyensúllyal foglalkozik, kitérve a fázisegyensúlyokra, az egyensúlyi alakra, a felület egyensúlyi minőségére. A második fejezet a homogén és heterogén magképződés kérdéseivel, valamint az epitaxiával foglalkozik. A harmadik fejezet a növekedés különböző mechanizmusait, míg a negyedik fejezet a szennyezők és a növekedés kapcsolatát tárgyalja. Az ötödik fejezet a kristályosodásnál fellépő anyag- és hőtranszportot taglalja és annak befolyását a növekedési frontra. A hatodik fejezet a kristályhibák képződésével, míg a hetedik az iparban fontos tömeges kristályosodás problémáival foglalkozik.

A II. rész, amelynek szerzői E. I. Givargizov, K. S. Bagdasarov, V. A. Kuznetsov, L. N. Demianets és A. N. Lobachev a kristályok növesztésével foglalkozik további három fejezetben. A nyolcadik

fejezet a gőzfázisból történő növesztést, a kilencedik az oldatból történő növesztést, a tizedik pedig az olvadékból történő növesztést tárgyalja.

Az 500 oldalas kötet kitűnő mű kristálynövesztéssel foglalkozók számára az alapismeretek elsajátításához. Haszonnal forgathatják egyetemi hallgatók és a kristálynövesztéshez közelálló területeken (kristályfizika, kristálykémia) dolgozó kutatók is, ha orosz nyelvismeret hiányában nem tudják az eredetit tanulmányozni.

V. R.

**Szabó György: Szuperionos vezetők
A Szilárdtestkutatás Újabb Eredményei 13
Akadémiai Kiadó, Budapest, 1984**

A szerkesztőbizottság jól választott, amikor a szuperionos vezetők kevésbé ismert témáját napirendre tűzte a sorozat egy kötetét kitöltő terjedelemben. A szuperionos vezetők kutatása mindössze néhány évtizedre tekint vissza, de fejlődése rohamos volt és ma már számos gyakorlati alkalmazást tesz lehetővé.

A szuperionos vezetőkön a szilárdtestek egy újabb csoportját értjük, amelyekben a rácsközi térben folyadékszerűen viselkedő mozgékony ionok vannak, amelyek elektromos tér hatására az áramot vezetik, ugyanúgy mint a folyékony elektrolitok. Éppen ezért szokták szilárd elektrolitnak is nevezni a szuperionos vezetőt. Ha arra gondolunk, hogy a ma elterjedt kénsavas akkumulátor helyett egy olyan akkumulátor hozható létre, ahol az elektrolit szilárd, az elektródok pedig folyékonnyak, tehát a kémiai folyamatok az elektróda felülete helyett az elektróda térfogatában zajlanak, lényegesen nagyobb tárolható energiasűrűséget biztosítva, mindjárt érzékelhető a szuperionos vezetők fontossága. Ilyen akkumulátort egyébként kifejlesztettek. A nátrium-kén akkumulátor 150–200 Wh/kg energiasűrűséget tárol, szemben az ólom akkumulátor 20–40 Wh/kg értékével.

A kötet 238 oldalon 10 fejezetben tárgyalja a legfontosabb ismereteket.

Az első két fejezetben a szerző általános tulajdonságokkal foglalkozik, vázolja a szerkezetet és fázisátalakulást. A harmadik fejezetben az ezüst jodid tulajdonságai, szerkezete és vezetése, a negyedikben a béta-aluminák tulajdonságai, szerkezete és vezetése kerülnek tárgyalásra. A béta-aluminák az alumínium-oxid és a nátrium-oxid sajátos kristályszerkezettel rendelkező vegyületei. Az ötödik és hatodik fejezetben a fluorit-szerkezetű és az egydimenziós szuperionos vezetők szerepelnek. A hetedik fejezet foglalkozik az alkalmazásokkal, mint pl. az akkumulátorok, szilárd galván elemek, tüzelőanyag cellák, termoelektromos generátor, oxigén detektorok, elektrokrmatikus kijelzők stb. A három utolsó fejezet elméleti alapokat nyújt a fázisátalakulások, és a diffúzió tárgyalásával. Hatoldalas irodalomjegyzék könnyíti meg a tárgy iránt mélyebben érdeklődőknek az eligazodást.

A kötet megjelenése hiányt pótol a magyar nyelvű szakirodalomban és jól felépített mondanivalójával kielégíti a sorozat célkitűzéseit.

V. R.

**Yu. I. Shokin: The Method of Differential Approximation
Springer Series in Computational Physics
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York—Tokyo, 1983**

A gyakorlati fizikus munka jelentős, ám nem nagy népszerűségnek örvendő része a fizikai problémákból adódó közönséges és parciális differenciálegyenletek megoldása. Ez általában numerikus eljárásokat kíván, az egyenleteket véges differenciaegyenletekké kell alakítani, amelyek aztán számítógéppel megoldhatók. A feladat néha egyáltalán nem egyszerű, hiszen gyakran már maga az egyenlet is igen bonyolult, amit még súlyosbít, hogy görbevonali koordináta-rendszerben kell felírni, vagy bizonyos szimmetria tulajdonságokra kell tekintettel lenni. Ez a könyv éppen ezeknek a problémáknak a megoldásához akar segítséget nyújtani.

A kötet matematikai szigorral, ugyanakkor a gyakorlatban kézikönyvszerű használhatósággal tárgyalja a véges differencia módszert. Használata azonban feltétlenül igényli az olvasó parciális differenciálegyenletek és differenciaegyenletek témakörében való jártasságát. Minden témakört megfelelő matematikai alapozás után tárgyalja, megmutatva a módszer problémáit és mindig osztályozza a felmerülő különböző típusú feladatokat. Mindehhez nagyon sok gyakorlati példával szolgál. A könyv végén részletes táblázatok teszik igazán használható kézikönyvé.

A kötet négy fő részből áll. Az első rész fő problémája a differenciálsémák stabilitása, azaz a differenciálegyenletekből alkotott differenciaegyenletek mennyire pontosan adják ugyanazt a meg-

oldást, mint az eredeti egyenlet. Itt, miután röviden bevezet a lineáris algebra és a differenciaegyenletek témakörébe, részletesen tárgyalja a differenciálsémák stabilitásmélettét különböző feltételezések mellett. A második fejezet a differenciálsémák szakadások körüli viselkedésével foglalkozik. Itt osztályozza a matematikai fizikában előforduló problémákat és megmutatja a nekik megfelelő differenciaegyenletek viselkedését, a folyadékok és gázok fizikájából vett példákkal szemlélítve az egyes típusokat. Itt ismerteti a görbevonallú koordináta-rendszerbeli differenciálsémák felírását is — ez nem csak az általános relativitáselméletben lehet fontos, hanem mindenütt, ahol henger vagy gömbkoordinátákban érdemes dolgozni. A harmadik rész témája a differenciálsémák invariancia tulajdonságai. Az általános csoportelméleti vizsgálat keretében a fő hangsúly a Lie-csoportokra kerül — hiszen a fizikai alkalmazásokban is ezek fordulnak elő leggyakrabban. Az invariáns egyenletek felírását az egydimenziós gázdinamika példáján mutatja be, igen részletesen. A negyedik rész összefoglaló táblázatokat tartalmaz, így a gyakorlati munkában a megfelelő sémák könnyen kikereshetők, és természetesen mindegyik tulajdonságait is részletesen ismerteti.

A kötet melegen ajánlható mindazoknak, akiknek parciális differenciálegyenleteket kell megoldaniuk számítógéppel, különösen, ha a megoldás stabilitását kell vizsgálni, ha görbevonallú koordináta-rendszerben kell dolgozni, illetve bizonyos szimmetriatulajdonságokat kell megkövetelni az egyenletekre.

Tóth András

**I. A. Kunin: Elastic Media with Microstructure II
Three-Dimensional Models
Springer Series in Solid-State Sciences 44
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York 1983**

A klasszikus rugalmasságtan homogén szilárdtestek rugalmas tulajdonságainak leírását valósítja meg. A gyakorlatban előforduló szilárd anyagok azonban nem homogének, hanem az alaplámpárisban meghatározott mikroszerkezettel rendelkeznek (pl. kristályhibákat tartalmazó egyébként homogén anyag, polikristály, kétfázisú rendszer, kompozitok, stb.). Az utóbbi két évtizedben jelentős erőfeszítések történtek olyan általános elméletek kidolgozására, amelyek lehetővé teszik az inhomogén anyagok rugalmas tulajdonságainak leírását.

A könyv az inhomogén anyagok rugalmas tulajdonságainak nemlokális elméletét tárgyalja. A nemlokális rugalmasság elméletek a mikroszerkezetre jellemző skála paramétereket (pl. hibák távolsága, szemcseméret, nem zérus hatótávolságú kölcsönhatási erők hatótávolsága, stb.) tartalmaznak. Emiatt vagy diszkrét modellekre (mint pl. a diszkrét rács modell) épülnek, vagy kidolgozásuk szükségessé teszi a klasszikus kontinuumelmélet fogalmainak jelentős általánosítását.

A könyv hét fejezetben (228 oldal terjedelemben) a lineáris nemlokális kontinuumelmélet három dimenziós esetre vonatkozó általános megalapozásával és néhány alkalmazásával foglalkozik. A bevezetést követő 2. fejezetben kialakítja a kvázikontinuum fogalmát, amely átmenetet képez a diszkrét modellek és a klasszikus kontinuum között. Ennek segítségével megfogalmazza az egyszerű szerkezetű (pl. homogén) testek nemlokális rugalmas alapegyenleteit. A 3. fejezet tartalmazza az összetett szerkezetű testek mozgásegyenleteinek megalapozását.

A 4. fejezet lokális hibák tulajdonságait tárgyalja. A tárgyalás alapját az képezi, hogy a hibák hatását a makroszkopikus rugalmas állandók perturbációjaként tekinti. Megadja a ponthibák tulajdonságainak nemlokális leírását (a ponthibák nemlokális kontinuumban nem képeznek rugalmas szingularitást) és általános megoldást ad az ellipszoid alakú térfogati hibára. Az 5. fejezet ismét ponthibákkal foglalkozik, ahol a hibák hatását most belső feszültségek forrásaként veszi figyelembe. A 6. fejezet ugyanilyen kiindulópontból írja le diszlokációk hatását, amelynek keretében megoldást ad végtelen közegebeli csavar és éldiszlokáció nemlokális rugalmas tulajdonságaira (a diszlokáció vonal mentén a diszlokáció energiája nem szinguláris). A 7. fejezet véletlen eloszlású inhomogenitások (pl. ponthibák, ellipszoid alakú térfogati hibák) hatását tárgyalja.

A kötetet 20 oldalnyi, a felhasznált matematikai apparátus egyes részleteit tárgyaló Appendix és 20 oldalnyi irodalmi hivatkozás zárja le.

A könyv nagy részben a szerző saját kutatási eredményeit foglalja egységbe és jó példát szolgáltat a szilárdtestek rugalmas tulajdonságainak modern kontinuumelméleti tárgyalására.

Dr. Kovács István

**Topological Disorder in Condensed Matter F. Yonezawa and T. Ninomiya (ed.)
Springer Series in Solid-State Sciences 46
Springer-Verlag, Berlin 1983**

A kötet a Japánban, 1982 őszén megtartott ötödik nemzetközi Taniguchi szimpózium anyagát tartalmazza. A Taniguchi Alapítvány által szervezett konferenciák jellemzője, hogy a résztvevők száma erősen korlátozva van, inkább workshop jellegűek, hogy az intenzív diskussziókat elősegítsék. A témát illetően pedig olyant választanak, mely nincs feltétlenül az érdeklődés homlokterében, de ígéretesnek tűnik. Ez utóbbi megállapítás feltétlenül igaz az 1983-as szimpóziumra, melynek témája kondenzált anyagok topologikus hibái volt. A 19 résztvevő, közülük mindössze öten nem japánok, 17 előadását tartalmazza a kötet. Ezt egészíti ki a kötet elején egy bevezetés a szervezőktől, illetve a végén egy konferencia összefoglaló M. H. Cohentől.

A topológiai rendezetlenséget általános értelemben használják, az atomi pozíciókban, illetve az első szomszédok között kötési irányokban megjelenő rendezetlenségre egyformán utal. Így a topológiai rendezetlen szinonim a nemkristályos vagy amorf szavakkal. Az amorf anyagok elméleti vizsgálata az alábbi három fő irányban haladt:

1. szerkezeti modellek konstruálása,
2. a modellekben a topológiai rendezetlenség jellemzése,
3. a fizikai tulajdonságok meghatározása.

Az első öt cikk éppen a topologikus rendezetlenség szerkezeti aspektusaival foglalkozik. Részben a topológia módszereivel vizsgálják, hogyan lehet tetraéderes vagy oktaéderes cellákból felépíteni egy hosszútávú rendet nem mutató szerkezetet, részben számítógépes simulációval szerkesztettek amorf modelleket. Ez utóbbiakon azután az üvegállapot fizikai tulajdonságait, termodinamikai (pl. fajhő) és dinamikai (pl. diffúziós állandó) mennyiségeket vizsgáltak.

Három cikk foglalkozik topológiai rendezetlen rendszerekben az elektronállapotok vizsgálatával. Egyrészt vizsgálják, hogy a rendezetlenség hatására az állapotsűrűségben milyen változás következik be, másrészt az elektronok terjedését határozzák meg diszlokációk közelében.

Az eddig tárgyalt témáktól némileg elütő területtel, a kétdimenziós rendezetlen rendszerek statisztikus mechanikájával is foglalkozik néhány cikk. Elsősorban a frusztráció hatását vizsgálják, illetve a kétdimenziósságból adódó speciális tulajdonságokat.

Az előadók közül csak néhányan sorolok fel, hogy látható legyen, a területen igen aktív, neves kutatók voltak jelen, mint pl. N. Rivier, H. M. Cohen, D. R. Nelson, F. Yonezawa. A kötet igen jó összefoglalókat tartalmaz, elsősorban azok számára, akik az üvegek szerkezetével kapcsolatos jelenlegi helyzetre kíváncsiak.

Sólyom Jenő

**W. Glöckle: The Quantum Mechanical Few-Body Problem
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York—Tokyo, 1983**

A kvantummechanikai többtest probléma elmélete, Fagyjev úttörő munkássága nyomán, az elmúlt évtizedekben páratlanul gyors fejlődésen ment át. Ennek ellenére e témakörben igen kevés szakkönyv áll rendelkezésre. Az alapvető eredmények az eredeti szakcikkek mellett főként csak konferenciákon elhangzott összefoglaló előadásokban találhatók meg. Ezért is kell örömmel üdvözölni W. Glöckle monográfiáját, amely elsőként lép túl a háromrészecske rendszer leírásán, és viszonylag egyszerű eszközök segítségével eljut a négyrészecske rendszer dinamikáját leíró Jakubovszkij egyenletekig.

A szerző tárgyalásánál csak a kvantummechanika alapjainak ismeretét tételezi fel, és a hagyományos módon építi fel a szórásfolyamatok dinamikájának elméletét. A szóráselmélet alapfogalmainak bevezetése után kerül sor a kétnukleon rendszer szóráselméletének ismertetésére. A hangsúly itt a matematikai problémák (pl. a folytonos spektrumhoz tartozó szórási állapotok „sajátfüggvényei”) helyett az alkalmazásokon van, de ez nem megy a pontosság rovására. Külön említést érdemel a spinfüggő effektusok igen részletes tárgyalása.

A háromtest problémának szentelt, kb. 80 oldal a Fagyjev módszer ismertetése mellett, a háromtest rendszer fizikájának az eddig létező irodalomban található legjobb leírását adja. Igen hasznosak az egyes alkalmazásokkal foglalkozó alfejezetek is.

A monográfia utolsó fejezete a négyrészecske probléma Jakubovszkij-féle egyenleteit ismerteti, a szakirodalomban elsőként, a megelőző fejezetekhez illeszkedő, egységes tárgyalásmód keretében.

Sajnos, ez a rész viszonylag rövid, és kár, hogy a szerző a Jakubovszkij-formalizmus mellett létező egyéb, egzakt elméletekkel néhány irodalmi utaláson kívül nem foglalkozik.

A könyv stílusa világos, könnyen érthető. A könyvet haszonnal forgathatják felsőéves egyetemi hallgatók és a témával foglalkozó kutatók egyaránt, anyaga pedig speciális előadások témájául is szolgálhat a tudományegyetemen.

B. Gy.

**Carl Nordling—Jonny Österman: Physics Handbook Studentlitteratur Lund;
Bratt Institut für Neues Lernen, Goch, West Germany;
Old Orchard, Bromley, Kent, England. 1982**

Nem véletlen három országban három kiadó. Magyarországon magyar kiadótól is megjelenhetne. Angol szövegű kiadása se volna kelendőségének útjában. Típusa folytán szakszótár feleségnek is megfelelhetne. A második kiadás nemcsak általános népszerűségét jelzi, de módot adott némi kiegészítésre, s korrigálásra. Ez utóbbi ilyen könyvnél akkor is állandóan szükséges, ha az eredeti szöveg kifogástalan volt, de adatpontosítás mindig bekövetkezhet, akár ha pontosabb mérés, akár, ha nemzetközi új megállapodás, felismerés következett be. Így van ez pl. a sugárdózisok egysége esetén. Igaz, most is van benne olyan táblázat (hangintenzitás, hangosság) is, amelyhez nem ártott volna megjegyzést fűzni. Ez ugyanis szélesben elterjedt, s talán kiirthatatlan tárgyi tévedésen alapul. Nem tud bejutni a köztudatba, hogy az érzet-inger összefüggésre nem érvényes a Weber—Fechner-törvény, azaz a két intenzitás között nem logaritmikus az összefüggés, hanem hatványkitevős (Stevens-törvény).

A fentiekkel nem kívánom kisebbiteni a könyv értékét. Teljesen elfogadom a szerzőknek azt az állítását, hogy egy kötetben összegezték a fizika egész világát... Így fontos tanulási eszközt adtak a hallgatók kezébe, nagyon értékes támogatást nyújtottak a hivatásos fizikusoknak. E kötetben gyorsan fellapozhatók az általában szükséges képletek és adatok, a fizika alapvető állandói S_i vagy más célszerű egységekben. Számos anyag — beleértve a periodikus rendszer elemeinek és csillagászati objektumok — mechanikai, hőtani, elektromos és más sajátosságai mind világos elrendezésben helyet kaptak ebben a könyvben. Megtalálhatók itt nagy választékban az alapvetően szükséges fizikai és matematikai jelölések és képletek, egyenletek, integrálok, a hibaszámítás elemei, s többek között még három valami: 1. a General Electric Company támogatásában kidolgozott — sajnos még 1977-es — színes, jól áttekinthető táblázata a nuklidoknak; 2. a könyvben való gyors tájékozódást segítő tárgymutató; 3. üres lapok, melyek a tulajdonos kiegészítéseit, feljegyzéseit várják.

T. Gy

Harald Fritsch: Vom Urknall zum Zerfall

Harald Fritsch a müncheni egyetem elméleti fizikai tanszéke professzora. Neve nem ismeretlen a modern fizika iránt érdeklődő nem szakemberek számára sem. H. Fritsch kiemelkedő szakmai tevékenysége mellett élvezettel és hozzáértéssel foglalkozik a modern fizika gondolatainak népszerűsítésével. Egy másik könyvéről már beszámoltunk e lap hasábjain, e könyv címe: „Quarks—Urstoff unserer Welt”. Most egy újabb könyvvel jelentkezett, amelyben a modern részecskefizika és az asztrofizika, kozmológia kérdéseit viszi közelebb a laikus olvasóhoz. A könyv minimális előismeretet tételez fel és magában foglalja a kvantummechanikától kezdve a modern részecskefizikán át az asztrofizikáig terjedő területet. Valóban a legkisebb (az atom, az atommag, az elemi részecskék, a kvarkok) és a legnagyobb (a csillagrendszerek, a galaxisok, az univerzum) valahol mélyen összefüggenek egymással. Mindaz, ami a „Nagy Robbanás” első másodpercében lezajlott, amely az univerzum keletkezésének a pillanata, mélyen összefügg a részecskefizikával, a legkülönbözőbb elemi részekkel. Közérthető módon, kvalitatíve megmagyaráz alapvető fogalmakat, mint pl. az antianyag, a kvarkok, a protonok lehetséges instabilitása, az univerzum időben véges vagy végtelen volta, stb. Ebben a könyvében is alkalmazza azt a nagyon ügyes didaktikai fogást, hogy az egyes oldalak margóján néhány rövid összefoglaló szó nemcsak azt jelzi, hogy a mellette levő szövegben miről van szó, hanem önmagában véve is összevont ismereteket nyújt a részletek nélkül. Könyvében sikerül emberközelbe hozni a fizika, a csillagászat boszorkánykonyhájának műhelytitkait anélkül, hogy részletismeretekkel terhelné az olvasót.

A 350 oldalas német nyelvű könyv élvezetes olvasmány az érdeklődőknek. A könyvet 55 ábra, illetve fénykép illusztrálja. A könyv R. Piper und Co. Verlag (München, Zürich) gondozásában jelent meg 1983-ban. Alig egy fél év alatt megért a 3. kiadást. Ez is mutatja a könyv népszerűségét, olvasmányosságát és tárgykörének érdekességét.

Kiss Dezső

**J. Weidmann: Lineare Operatoren in Hilberträumen
B. G. Teubner, Stuttgart, 1976**

A mű, azonkívül, hogy bevezetést nyújt a funkcionálanalízisbe, ennek ezen túlmenő, a fizikai alkalmazások felé irányuló témaköreinek elemeit is tárgyalja. Az egyszerűbb érthetőség kedvéért a kifejtést korlátozza Hilbert terek esetére, és megértéséhez a matematikus és fizikus hallgatók számára szokásos alapismeretek körében csupán a függvénytanban és a differenciálegyenletek elméletében feltételezi a maximális mélységet. Negyed- és ötödéves hallgatóknak, aspiránsoknak és kutatóknak is egyaránt ajánlható. A 11 fejezetből az első három a Hilbert-tér fogalmával foglalkozik. A negyedik fejezet a lineáris operátorokra és adjungáltjaikra vonatkozó alapismereteket tárgyalja, míg az ötödik és hatodik operátorok egyes legfontosabb családait: zárt, szimmetrikus, önadjungált, normális, illetve kompakt, Hilbert–Schmidt, integrál- és differenciáloperátorokéit mutatja be. A hetedik fejezet tárgya az önadjungált és a normális operátorok spektrálemelélete, míg a nyolcadikban szimmetrikus operátorok önadjungált kiterjesztéseivel ismerteti meg a szerző. A befejező három fejezet az alkalmazási perspektívákat tárgyalja kivonatosan: a kilencedik önadjungált operátorok perturbáció elméletét, a tizedik az $L_2(\mathbb{R}^n)$ -en adott differenciáloperátorok elméletét, míg a tizenegyedik a szóráselméletet (scattering theory). A két függelék a Lebesgue integrál fogalmáról és egy holomorf függvényekre vonatkozó reprezentációról ad rövid bevezetőt. Számos példa (93) és feladat (221) segíti elő a mélyebb megértést.

Szász Domokos

**S. V. Vonsovsky, Yu. A. Izyumov, E. Z. Kurmajev:
Superconductivity of Transition Metals
Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1982**

A közelmúltban számos olyan mű jelent meg a nemzetközi fizikai irodalomban, amelyek érdekes és hasznos információkat szolgáltatnak a több komponensű szupravezetőkéről. Ezek közé tartozik Vonsovsky, Izyumov és Kurmajev műve, amelyek eredeti orosz címe is már utal arra, hogy elemzi az átmeneti fémek ötvözeiteinek és vegyületeinek szupravezetési tulajdonságait is. E könyv a Springer Könyvkiadó szilárd test tudományok sorozatának 27.-ik köteteként jelent meg.

A művet olyan avatott szerzők publikálták, akik maguk is a modern szupravezetési kutatások nemzetközileg elismert mesterei köré tartoznak és kitűnő szakértői az átmeneti fémek (ötvözeiteik és vegyületeik) szupravezetésével kapcsolatos jelenségeinek.

Figyelemre méltó tény, hogy az utóbbi időben megnőtt azoknak a könyveknek a száma, amelyek az összetett anyagok szupravezetési tulajdonságaival foglalkoznak.

A közelmúltban csak a Springer három olyan művet adott ki, amelyek a különböző (köztiük átmeneti) fémek szupravezetésének ismertetését tűzték ki célul maguk elé.

Kérdés, hogy érdemes-e viszonylag rövid időtartam alatt ilyen nagy számú, lényegében hasonló tematikájú könyvet kiadni. A kérdésre két szempontból is egyértelműen pozitív válasz adható. Egyrészt a különböző szerzők még a teljesen azonos problémákat is más szempontok szerint vizsgálják, másrészt az új meg új irodalmi információk újabb és újabb összefoglalása olyan következtetések levonásához vezet, amelyek további inspirációt adhatnak a kutatások folytatásához.

E mű ilyen szempontból is hasznos vállalkozásnak tűnik. Gazdagítja a szupravezetés aktuális irodalmát és segíti a további kutatásokat.

A könyv 9 fejezetre oszlik, amelyek az alábbi témaköröket tárgyalják:

1. Bevezetés (amely röviden áttekinti a szupravezetés alapvető jelenségeit).
2. Erősen csatolt szupravezetők elmélete.
3. Szupravezetés és mágnesség.
4. Átmeneti fémek szupravezetése.
5. Szupravezetés átmeneti fém ötvözetekben.
6. A-15-ös szupravezető vegyületek.
7. Másfajta, átmeneti fém alapú vegyületek.
8. Magas hőmérsékletű szupravezetők és vegyületek rács instabilitásai.
9. Sugárzási effektusok szupravezetőkben.

A bőséges terjedelemben, 512 oldalon megírt könyv nagyon jó felépítéssel, kiváló szakszerűséggel tárgyalja a témakörbe tartozó problémákat.

Az elvi, alapkutatói (kísérleti és elméleti) ismereteket számos fontos adattal egészíti ki, és a gyakorlat, az alkalmazások számára is hasznos ismereteket nyújt.

A Ti, V, Zr, Nb, Mo, Ru, Hf, Ta, W, Re és Os átmeneti fémek szinte minden egyes fontos ötvöze, illetve vegyülete legalább példaként szerepel és így módon jellemző adataik kézikönyvszerű kötetként is forgatható e mű.

Módot talál olyan fontos kérdések vizsgálatára, mint a Chevrel-fázisok, a mágneses szupravezetők, a szupravezető kalkogenidek, vagy pl. a különböző szerkezeti fázisok koegzisztenciájának, illetve a szupravezetés és ferromágnesség problematikájának elemzésére.

Mindezt figyelembe véve azt mondhatjuk, hogy ezzel a könyvvvel a szupravezetés irodalma oly módon gazdagodott, hogy a fundamentális kérdések kutatói és a szupravezetési jelenségek alkalmazói egyaránt egy sokoldalúan hasznosítható és gyakran forgatandó mű birtokába jutottak.

Kirschner István

**N. M. Plakida (szerk.), V. L. Aksienov, S. Stamenković
Rasszejanie nejtronov szegnetoelektrikami
Energoatomizdat, Moszkva, 1984**

A modern rádiótechnikai, elektronikai, mikroelektronikai és optikai ipar egyre növekvő mértékben használja fel a ferroelektromos tulajdonságokkal rendelkező anyagokat, így az elmúlt évtizedben a fizikai kutatás területén is egyre inkább a figyelem homlokterébe került ezeknek az anyagoknak a kutatása, egyre fontosabbá vált a bennük lejátszódó jelenségek pontosabb megértése. Jól lehet számos jó összefoglaló cikk és monográfia jelent meg ezen kutatások eredményeiről, a szerzők számos új eredmény, eredeti gondolat ismertetésével, mások eredményeinek újragondolt összefoglalásával a szilárdtest-fizika, neutronspektroszkópia területén dolgozó kutatóknak, felsőbbéves egyetemi hallgatóknak nagy segítséget képesek nyújtani, ezért a könyv megírása hasznos és időszzerű vállalkozás volt. A könyv a strukturális fázisátalakulások modern elméletébe is kiváló bevezetést jelent.

A könyv alapvető témája a rugalmas és rugalmatlan neutronszerzés jelenségeinek vizsgálata a strukturális fázisátalakulás környezetében. A strukturális fázisátalakulást mutató kristályok rácsdinamikáját modellek tanulmányozása alapján mutatják be a szerzők, egyaránt alkalmazva vizsgálataikban a self-consistent fonon-tér, a pszeudospin és koherens potenciál módszert, illetve leírás-módot. A kísérleti tapasztalatokat összegezik és egybevetik a modell-számítások eredményeivel. Tárgyalják a nemlineáris gerjesztéseknek és a rácshibáknak a hatását is a neutronok szóródására.

A könyv első fejezete bevezetés a neutronszerzés és a rácsdinamika elméletébe a strukturális fázisátalakulások környezetében. A második fejezet a strukturális fázisátalakulások elméleti modelljét ismerteti, kitérve a nemlineáris effektusokra és a rácshibáknak a hatására is. A harmadik és negyedik fejezet pedig rend-rendezetlen típusú, majd rácszorzulással járó fázisátalakulások esetében vizsgálja a neutronszerzés jelenségeit és hasonlítja össze a kísérleti eredményeket az elméleti modellszámítások eredményeivel.

S. T.

**Salikhov, K. M., Molin, Yu. N. (editor), Sagdeev, R. Z. és Buchachenko, A. L.:
Spinpolarizáció és mágneses hatások gyökreakciókban**

A „Spinpolarizáció és mágneses hatások gyökreakciókban” című könyvet az Akadémiai Kiadó, Budapest és az Elsevier Science Publishers, Amsterdam kiadók jelentették meg közösen 1984-ben, mint a „Studies in Physical and Theoretical Chemistry” sorozat 22. kötetét.

A könyv célja egy olyan új és igen intenzíven fejlődő tudományterületnek a bemutatása és összefoglalása, mely a fizikai-kémiaihoz tartozik és a mágneses spektroszkópia és a kémiai kinetika határterületén helyezkedik el. Mivel a könyv a szerzők által korábban közölt monográfián alapszik, ezért a könyv végén több mint ötszáz — a fejezetek szerint felosztott — irodalmi hivatkozás található.

A bevezető fejezet után, mely a tudományterület áttekintését adja, a második, harmadik és negyedik fejezetek alaposan és mélyen tárgyalják a gyök-rekombináció, a mágneses hatásokat a gyökreakciókban, valamint a kémiai indukált dinamikus magspinpolarizációt (CIDNP) és elektronspinpolarizációt (CIDEP). A különböző hatások és jelenségek fizikai, fizikai-kémiai értelmezését és ezek leírására, kiértékelésére szolgáló matematikai módszereket is eme fejezetek tartalmazzák. A gyökreakciókban fellépő mágneses hatásokat tárgyaló fejezetben (3. fejezet) az alacsony és nagy télerősségek hatását külön tárgyalják; majd ezt követően néhány oldalon a mágneses izotóp-effektust ismertetik. A negyedik fejezetben található a spinpolarizációs hatások kitűnő elméleti tárgyalása,

ezek spektroszkópiai manifesztációjukkal együtt. Mivel az alacsony és nagy mágneses terek spin-dinamikája különböző, ezért ezeket külön alfejezetekben (4.2 és 4.3) tárgyalják. Ugyancsak ebben a fejezetben diszkutálják a kémiai indukált dinamikus magspinpolarizációt biradikál reakciókra, a kémiai indukált dinamikus elektronspin-polarizáció elméletét gyökpárookra, valamint a triplet mechanizmust vagy triplet modellt.

A következő fejezeteket (5.—8.) a szerzők főként kísérleti megfigyeléseknek szentelték, melyek a sok táblázat, ábra és kísérleti adat révén azon szakemberek számára hasznos, akik a fizikai-kémia ezen területén dolgoznak. Ezek a fejezetek foglalják össze azokat a kísérleti eredményeket, melyek a mágneses térnek gyökreakciókban tapasztalt hatásával, a mágneses izotópeffekttussal és a CIDNP valamint a CIDEP jelenségek kísérleti megfigyelésével foglalkoznak.

A könyv fejezeteinek tartalma, a témakör tárgyalásának mélysége — gondos kiadói munkával együtt — eredményezi azt, hogy a kiadott monográfia nagy segítség lehet azon fizikusok, kémikusok és biológusok vagy más érdeklődő szakemberek számára, akik a fizikai-kémia ezen területén dolgoznak.

G. P.

Equipment and Techniques Ion Implantation:

Springer Series in Electrophysics 11

H. Ryssel and H. Glawisching (ed. s)

Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York—Tokyo, 1983

Az ionimplantáció műveletével szemben támasztott igények visszahatottak a berendezések tervezésére, kivitelezésére. Az a szándék vezérelte és vezérli a téma vezető kutatóit, hogy az implantáció során lezajló fizikai folyamatok jobb megértése és így tudatosan alakított rétegek előállítása, illetve a feladathoz jól illeszkedő implanterek kifejlesztése egyenszilárdan folyjék. Ezért rendezik párhuzamosan és egymást szorosan követően az Ion Beam Modification of Materials nevű konferenciák és az Ion Implantation: Equipment and Techniques konferenciasorozat összejöveteleit.

A most ismertetendő könyv annak a konferenciának az anyagát foglalja kötetbe, amely 1982. szeptember 13—17 között került megrendezésre Berchtesgadenben (NSZK) és amely a Grenoble-ban egy héttel korábban rendezett IBMM-et követte. Meg kell említeni, hogy nemrég ismertettük a Springer Series in Electrophysics 10. kötetét, amely ezen IET konferenciával egyidőben, az ipari szakemberek számára rendezett iskola anyagát foglalta össze.

A könyvünk terjedelmének mintegy két ötöde foglalkozik a berendezésekkel. A mai frontvonalak e téren az ipari igények maximális kielégítésére alkalmas, teljesen automatizált berendezések kifejlesztése terén húzódnak. Remélhető, hogy egyre inkább egyszerűsödik a kezelő szempontjából az implanterek üzése, és a bonyolultság ellenére is növekvő üzembiztonság érhető el. Fokozatosan tolódik a berendezésfejlesztés a nagy (< 500 kV) és a nagyon kis (< 5 kV) energiájú berendezések irányába. A termelőberendezések nagy áteresztőképességének biztosítása is sok technikailag érdekes megoldást hívott elő. A különlegességek között találunk pl. poralakú tárgyak implantálására alkalmas elrendezést. E témában találhatók a KFKI kutatóinak a berendezések terén elért újabb eredményeit ismertető közlemények is.

Külön fejezet foglalkozik az ionsugaras litográfia eredményeivel. Közismert, hogy a litográfiai eljárások terjedtek el a mikroelektronikában a laterális strukturálás megvalósítására: a maratási eljárásoknak ellenálló rezisztrétegeket, amelyek egyúttal érzékenyek fényre, részecskékre, egy maszkon át exponálják és a rajzolat szerint eltávolítják azt. Így a reziszt nyílásain át hozzá lehet férni pl. a szilícium felületéhez. Ma legelterjedtebb a fotolitográfia, de ipari gyakorlatnak lehet kijelenteni az elektron litográfiát és — többé-kevésbé — a röntgen litográfiát is. Az ion litográfia a legújabb. Ennek több előnye látható ma már. Például a lakkok több nagyságrenddel érzékenyebbek az ionokra, mint az elektronokra. Azonkívül a kisebb behatolási mélység miatt vékonyabb rezisztréteg elegendő, amely az alaktartásra hat jótékonyan.

Kiemeljük azt a fejezetet, amely a fémek implantálásával kapcsolatos újabb kutatásokat, eredményeket foglalja össze. Imponáló a Harwell-i kutatóintézet ilyen tevékenysége és a több méteres vákuumrendszerekben végrehajtott implantációk, amelynek révén pl. egy-egy acél gépelem kopásállóságát növelték meg olyan mértékben, hogy a tárgy élettartama több, mint tízszeresére nőtt. Ez a terület most áll rendkívüli fejlődés előtt.

A félvezetők implantációjával foglalkozó fejezet néhány érdekes eredményt mutat be, amely az implantáció műveletének gondjait véve számba pl. foglalkozik azokkal a korlátokkal, amelyek a MOS VLSI gyártásban lépnek fel a kis méreteknél kényszerű nagy adalékkoncentrációk stb. esetén, vagy ismertet nagyenergiájú implant rétegeket, amelyek ún. eltemetett rétegekként használhatók.

Az utolsó szekció a gyors hőkezelésekkel foglalkozott, elsősorban a lézerekkel végrehajtott hőkezelésekkel. E téren azonban a konferencia inkább sporadikus ismereteket dolgozott föl a meghívott előadásokon kívül, amelyek itt is, mint a többi szekcióban a tárgykör jó színvonalú ismertetését adták.

A konferencia a következő alkalommal az USA-ban kerül megrendezésre, 1984-ben.

Gyulai József

C. A. J. Fletcher: Computational Galerkin Methods
Springer Series in Computational Physics
 Springer-Verlag, New York—Berlin—Heidelberg—Tokyo, 1984

Ma már minden szakember számára közhely, hogy a számítógépek, a számítástechnikai módszerek forradalmian új lehetőségeket teremtettek a tudományos kutatásban (is). Érdekes módon azonban a különböző alkalmazási területeken egymástól gyakorlatilag független számítástechnikai módszerek váltak uralkodóakká. Így például a véges elemek módszerét szinte kizárólag az anyagszerkezeti, mechanikai feladatok megoldására alkalmazzák. A spektrális módszer elsődleges alkalmazási területe az atmoszféra-kutatás, az időjárás-előrejelzés. A szárnyprofilok, repülőgéptörzsek körül kialakuló áramlás leírásában, a repülőgéptervezésben főleg a véges differenciák módszerét preferálják.

A kötet célja és tárgya a különböző, egymástól függetlenül kidolgozott és sokszor függetleneknek tartott számítástechnikai módszerek kapcsolatának a megmutatása. Erre a célra a legalkalmasabb a számos területen alkalmazható és alkalmazott Galerkin-féle módszer, minthogy ezzel mind a véges elemek módszere, mind a véges differenciák módszere, mind pedig a spektrális módszer generálható.

A Galerkin-módszer nem csupán a különböző számítástechnikai módszerek kapcsolatának a megmutatására alkalmas, hanem a különböző módszerek összehasonlítására, előnyei és hátrányai vizsgálatára is.

A különböző módszerek összevetése céljából a szerző ugyanazon, konkrét problémák megoldására alkalmazza őket. Az egyes modelleket részletesen elemzi, bátorítást adva ezzel a témában kevésbé járatos olvasónak. A könyv a lökéshullámok szerkezetének és terjedésének vizsgálatára részletesen kidolgozott — FORTRAN IV. nyelven írt — programot tartalmaz. A program a tradicionális Galerkin-módszer, a véges elem módszer, a véges differenciák módszere és a spektrális módszer ötvözetének tekinthető.

A könyv tartalma tehát: a Galerkin-módszer általános tulajdonságainak az ismertetése; a számítástechnikai módszerek illusztrálása gyakorlati példák segítségével; az egyes módszerek matematikai elemzése és hibabecslés; az egyes módszerek, ill. alkalmazásuk kiterjesztésének a lehetőségei; konkrét, speciális alkalmazások.

A szerző a könyvet elsősorban alkalmazó fizikusoknak és mérnököknek szánta; haszonnal forogathatják azonban programozó és alkalmazott matematikusok is.

Szabó János

Olivier Pironneau: Optimal Shape Design for Elliptic Systems
Springer Series in Computational Physics
 Springer-Verlag, New York—Berlin—Heidelberg—Tokyo, 1983. pp. 168

Adva van egy elliptikus differenciálegyenlettel vagy egyenletrendszerrel leírható fizikai rendszer. Hogyan kell a rendszer peremét megválasztani, hogy a megoldás egy adott tartományban előírt feltételeknek eleget tegyen? Milyen módszerekkel lehet az ilyen differenciálegyenleteket megoldani, az adott feltételeket kielégítő megoldást vagy megoldásokat megkeresni? Ez a témája a kötetnek.

Íme, néhány konkrét példa.

Egy hengeres áramlási csatorna két végén adott a nyomás. Milyen alakúra kell a csatorna merev falát kiképezni, hogy a csatornán belül adott tartományban a sebességnek egy előírt értéktől való eltérése minimális legyen?

Stacionárius áramlási térbe adott térfogatú testet helyezünk. Milyen legyen a test alakja, hogy az áramló közeg által rá kifejtett erő minimális legyen?

Egy elektromágnes segítségével adott tartományban homogén mágneses teret kívánunk gerjeszteni. Megoldható-e ez a feladat, és ha igen, milyenre kell a ferromágneses mag és köpeny alakját kiképezni?

A kiragadott példák is mutatják: a könyv tartalma a legjobb értelemben vett alkalmazott matematika. A fejezetcímek felvilágosítást adnak a kötet tartalmáról: Elliptikus parciális differenciálegyenletek (a Green-formula; Szoboljev-terek; másodrendű, lineáris parciális differenciálegyenletek; a másodrendű, parciális differenciálegyenletek numerikus megoldási módszerei; egyéb elliptikus egyenletek; a megoldás függése a perem alakjától). Probléma-felvetés (műszaki-fizikai példák; megoldási elvek; a módszer műszaki alkalmazásai; történeti áttekintés). A megoldások egzisztenciája (Dirichlet-féle feltételek; Neumann-féle feltételek). Optimalizációs módszerek (a probléma leírása; a gradiens módszer; a Newton-féle módszer; a konjugált gradiens módszer; kiegyenlítéses optimalizáció). A kontrol-elmélettel megoldható tervezési problémák. Az optimalizáció feltételei. A véges elemek módszere. Egyéb megoldási módszerek. Két műszaki probléma (elektromágnes optimális tervezése; optimális szárnyprofil).

A tárgyalásmód világos, a közölt bizonyítások gondolatmenten jól követhető, de feltételezi a parciális differenciálegyenletek elméletének és a variációszámítás alapjainak az ismeretét. Bőséges irodalomjegyzék és gondosan összeállított tárgymutató könnyíti a könyv használatát, ill. ad útmutatást és ösztönzést azoknak, akik a kötetben nem közölt bizonyítások vagy további alkalmazások iránt érdeklődnek. A könyv kiállítása mintaszerű, ízléses.

Szabó János

Richard J. Goldstein (ed.): Fluid Mechanics Measurements
Hemisphere Publishing Corporation, Washington—New York—London, 1983

A műszaki igények megnövekedése, a hidrodinamikai számítástechnikai módszerek, a különböző turbulencia-modellek eredményeinek a kísérleti ellenőrzése, a folyadékszerkezet mélyebb megértésének az igénye szükségessé tette a klasszikus áramlástani mérési módszerek finomítását és új mérési módszerek kidolgozását. Ennek leírása a célja és tárgya a könyvnek.

Az első fejezet tartalma az áramlást jellemző legfontosabb paraméterek, e paraméterek kapcsolatának a rövid összefoglalása, a hidrodinamikai mérési elvek tömör diszkussziója. A második fejezet tárgya a hidrodinamika alaptörvényeinek és tételeinek áttekintése, a mérési módszerek elméleti megalapozása.

A legutóbbi évekig a lokális sebesség, a térbeli és időbeli sebességgörreláció mérésének szinte kizárólagos eszköze volt a differenciál-manométer, a hőszálas, ill. a hőfilmes, közvetett sebességmérő. Különböző típusaik leírását tartalmazza a harmadik és a negyedik fejezet. A hatvanas években kifejlesztett lézer-Doppler-sebességmérés — az előző módszerekkel szemben — az áramlási teret nem perturbálja. E nagy pontosságú és valóban lokális sebességmérési módszer elvi-elméleti alapjai, a mérőeszközök műszaki leírása, a mérési eredmények kiértékelésének a metodikája a tárgya az ötödik fejezetnek.

A hatodik fejezetben a műszaki gyakorlat számára fontos mérési módszerekről és eszközökről olvashatunk: a térfogati, ill. a tömegáram intenzitásának a mérési módszereiről. A következő két fejezetben az áramlás szemléletes megjelenítéséről, vizualításáról olvashatunk: hogyan, milyen módszerekkel és festékanyagokkal lehet az áramvonalakat közvetlenül megfigyelhetőekké tenni és a megfigyelésekből kvalitatív és kvantitatív következtetésekre jutni.

Vannak olyan áramlástani problémák, amikor a folyadékban szuszpendált részecskék mozgásának a nyomkövetése a feladat. Máskor az optikai törésmutató változása alapján következtethetünk az áramlást jellemző paraméterek változásaira. Ez a tárgya a hetedik fejezetnek. A nem-newtoni folyadékok, valamint a két fázisú folyadékok áramlási paramétereinek a mérési módszerei képezik a kilencedik és a tizedik fejezet témáját. Végül az utolsó, a tizenegyedik fejezetben a határretegben kialakuló speciális feszültségek mérési lehetőségeit ismeri meg az olvasó.

A könyv a téma specialistáinak kiváló munkája. Szervesen ötvöződik benne az elméleti leírás, a kísérleti lehetőség és a gyakorlat igénye. Azon kívül, hogy a könyv a hidrodinamikai mérési módszerekről szinte hiánytalan áttekintést ad (legfeljebb a neutronsórásos alapuló módszer szűkszavú), a könyvnek talán a legnagyobb értéke: az elmélet és a gyakorlat szerves egysége. Kiváló minőségű fényképek, mind szakmai, mind pedagógiai szempontból jól kivitelezett ábrák, bőséges irodalomjegyzék, gondosan összeállított tárgymutató: további értékei a könyvnek.

A recenzens melegen ajánlja a könyvet minden fizikusnak és mérnöknek, minthogy — szakterületüktől függetlenül — hasznos információkat szerezhetnek belőle arról, hogyan kell a mérési módszert megválasztani, a mérési eszközt megkonstruálni, hogy a legkisebb anyagi befektetéssel a legtöbb információhoz jussunk. Mert: "Almost all sophisticated equipment purchased for general or unspecified use is a waste of money." (4. oldal.)

Szabó János

Tuncer Cebeci, Peter Bradshaw: Physical and Computational Aspects of Convective Heat Transfer

Springer-Verlag, New York—Berlin—Heidelberg—Tokyo, 1984

A sugárzásos és a vezetési hőátadással szemben a konvektív hőtranszport szoros csatolásban van az impulzuscserével; a konvektív hőtranszport leírásához tehát az impulzus- és az energiaegyenletek egyidejű megoldása szükséges. A könyv témája a hőtranszport analitikus és/vagy numerikus leírása gyakorlati szempontból fontos folyadékaramlásokban.

Az első fejezet bevezető, ill. tájékoztató jellegű: a szerzők egyszerű példákkal igyekeznek megvilágítani a tárgyalandó problémakör lényegét, a használandó műszaki-fizikai fogalmakat. Ez a fejezet a témához tartozó, legfontosabb mennyiségek dimenziójának és angolszász, ill. SI egységének az ismertetésével zárul.

A második fejezet tárgya a hidrodinamika és a termodinamika alapegyenleteinek az összefoglalása. A szerzők itt azt a — 30—40 évvel ezelőtt a magyar műszaki szakirodalomban is szokásos — módszert követik, hogy a mérlegegyenleteket elemi téglatestre, koordinátás alakban fogalmazzzák meg. Lehet, hogy ez a módszer „szemléletes”, de biztosan nehézkes és túlságosan speciális. Érthetetlen, hogy a szerzők a felsőéves és végzett fizikusoknak és mérnököknek szánt könyvben a vektoros írásmódtól miért idegenkednek: a 487 oldalas áramlástan szak- ill. tankönyvben egyetlen vektor sem fordul elő! Ez a fejezet a turbulens áramlás Reynolds-féle egyenleteinek az ismertetésével zárul.

A kötet további fejezeteinek a tárgya a hőtranszport, ill. a hőmérséklet-eloszlás leírása speciális folyadékaramlásokban. A lehetséges és a gyakorlati szempontból fontos esetek száma igen nagy.

Igen sokféle lehet a hőmérsékleti térre kiszabott peremfeltétel, s ezekhez járulnak a sebességtérre kirótt peremfeltételek. A hőforrás benne lehet a folyadékban (kémiai reakció, surlódás) vagy lehet külső hőforrás. A könyvben szinte minden gyakorlati szempontból fontos esetre találunk példát. Némelyiknek az ismertetése azonban kézikönyvbe illően tömör.

Az utolsó két fejezetben néhány speciális hőátadási feladat számítógépi (Fortran-nyelven írt) programját találja az olvasó.

A függelék tartalma: A) Az előforduló mennyiségek angolszász és SI egységeinek az átszámítása. B) A gyakorlati szempontból fontos gázok és folyadékok áramlástan és hőtan jellemzőinek a táblázata. C) A gamma- és a béta-függvények táblázata. D) A Head-féle módszer Fortran-programja.

A könyv végén részletes tárgymutató, az egyes fejezetek végén bőséges irodalomjegyzék és nagy számú gyakorló példa található. A példák, ill. feladatok egy részét a magyar fizikushallgató túlságosan egyszerűnek fogja találni.

Szabó János

J. K. Plattens, J. C. Legros: Convection in Liquids

Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York—Tokyo, 1984

A brüsszeli termodinamika-iskolához tartozó szerzőpáros könyve az irreverzibilis termodinamika, az egyensúlytól távoli hidrodinamikai rendszerek nemlineáris problémáinak közelítő, számítógépes megoldási módszereiről nyújt figyelemre méltóan alapos áttekintést.

A kötet kiemelkedő értéke, hogy a numerikus módszerekben kevésbé járatosak is nagy haszonnal és nem kevesebb élvezettel forgathatják.

Az „A” bevezető rész egy fizikai és egy matematikai fejezetre oszlik. A fizikai rész a folyadékmechanika és a termodinamika fenomenologikus egyenleteit foglalja össze. A megmaradási és a mérlegegyenletek, valamint a konstitutív egyenletek kellően általános tárgyalásán kívül speciális, az alkalmazások szempontjából hasznos esetek is helyet kapnak ebben a fejezetben. A matematikai fejezet a számítógépes megoldási módszerek matematikai alapjait ismerteti. A végeselem-módszert érintőlegesen tárgyalja — mondván, hogy ezzel számos monográfia foglalkozik. Annál nagyobb figyelmet szentel viszont a nem egyensúlyi termodinamika megmaradási tételei variációs elvvel történő kezelésének, valamint a lokális potenciál elméletének.

A kötet „B” része állandó sűrűségű, izoterm folyadékok nem spontán konvekcióját tárgyalja a hidrodinamikában szokásos — Poiseuille—Cuette — esetekre. Ezek az áramlások csak bevezetőül szolgálnak a stabilitásvizsgálatok, periodikus áramlástípusok tárgyalásához. Miként a kötet többi részében, itt is sor kerül mind a linearizált, mind pedig a nemlineáris stabilitásvizsgálatra. A linearizált stabilitásvizsgálat alapját az Orr—Sommerfeld-egyenlet képezi.

Az (első) kritikus Reynolds-szám fölött megjelenő oszcilláló, másodlagos áramlás stabilitási problémáira is kitérnek a szerzők. Külön fejezetet találunk a nem-newtoni folyadékok áramlásának a stabilitási kérdéseiről. Ismert jelenség, hogy a newtoni folyadékban igen kis koncentrációban jelenlevő oldott polimerek jelentősen megváltoztatják az áramlás jellegét. Ilyen másodrendű viszkoeelasztikus folyadékokra általánosított Orr—Sommerfeld-egyenlet felállítására, illetve numerikus vizsgálatára találunk szép mintapéldát a „B” rész zárófejezetében.

A „C” rész egykomponensű folyadék nem izoterm, spontán és nyomásgradienssel hajtott konvekcióját, illetve az ilyen áramlások során fellépő speciális struktúrákat elemzi. E jelenség iskolapéldája az alulról fűtött folyadékréteg — az ún. Benard-probléma. Számos változatban tárgyalják a szerzők: szabad felszínnel és anélkül, mágneses tér jelenlétében, linearizált egyenletekkel, valamint a nemlinearitások megtartásával is. A Benard-jelenség valóban több szempontból is figyelemre méltó. Egyrészt szép példája annak, hogy egyensúlyi állapottól távoli rendszerek milyen szabályos struktúrákat képesek mutatni (itt konvekciós cellák), másrészt e probléma nemlineáris egyenleteinek Fourier-térben csonkított — csak néhány módust tartalmazó — „maradványai” számos olyan jelenséget mutatnak, amelyek a turbulenciára jellemzőek. (Lorenz-modell.)

A szerzők a „D” részben a többkomponensű rendszerekkel foglalkoznak. A bevezető részben a megmaradási tételek és a konstitutív egyenletek többkomponensű közegre érvényes formáival találkozunk az olvasó. Ennek a résznek a következő fejezete a termodiffúziót, illetve a konvekció és termodiffúzió együttes jelenségét ismerteti.

Az ilyen esetekben jelentkező stabilitási problémák linearizált egyenleteinek diszkusszióját zömmel analitikus eszközökkel végzik el a szerzők. A nemlinearitás hatását azonban már numerikus módszerekkel veszik figyelembe.

A könyv tartalmának a megértését számos ábra, ill. diagram segíti. Tekintélyes mennyiségben találunk számítógépes adatokat és a mérési eredmények összehasonlítását bemutató táblázatokat. Az alkalmazott, illetve alkalmazható numerikus eljárások ismertetése azonban kissé szűkszavú.

Szabó János

**Tuncer Cebeci (ed.): Numerical and Physical Aspects of Aerodynamic Flows
Springer-Verlag, New York—Heidelberg—Berlin, 1981. pp. 636**

A kötet az azonos című szimpóziumon (Kaliforniai Állami Egyetem, 1981. január 19—21.) elhangzott előadások módosított, bővített szövegét tartalmazza. A szerkesztő írta előszó szerint a szimpózium megrendezésének az volt a célja, hogy „1. a témával foglalkozó kutatók prezentálhassák a tárgykörben elért legújabb eredményeket, hogy 2. a jövőre vonatkozólag megvitassák a prioritás kérdéseit, és hogy 3. a közvetlen diszkussziók során feltárják az aerodinamika fejlődésének lehetséges irányait.”

A kötet öt fejezetre oszlik: numerikus módszerek a hidrodinamikában; kölcsönható, stacionárius határrétegek; szingularitások az instacionárius határrétegekben; hangsebességnél nagyobb sebességű (transzszónikus) áramlások; kísérleti áramlástan.

Az utolsó négy fejezet elsősorban a tárgykör specialistáinak (turbina-lapát-tervezőknek, repülőgép-tervezőknek) ad hasznos információt a téma legújabb eredményeiről és számítási módszereiről, az első fejezet azonban (numerikus módszerek a hidrodinamikában) általánosabb érdeklődésre tarthat számot, minthogy az itt alkalmazott matematikai módszerek — mutatis mutandis — a fizika más területein is hasznosíthatók.

A téma iránt érdeklődőknek az egyes fejezetek végén található, bőszeges irodalom ad hasznos útmutatást.

Szabó János

Tuncer Cebeci (ed.): Numerical and Physical Aspects of Aerodynamic Flows II
Springer-Verlag, New York—Berlin—Heidelberg—Tokyo, 1983

A kötet az azonos című konferencián (California State University, Long Beach, 1983. jan. 17—20) elhangzott előadások egy részét tartalmazza. A konferencián 48 előadást tartottak, ezek közül a szerkesztő azokat vette be a kötetbe, amelyek a két dimenziós áramlásokkal foglalkoznak, vagy speciális jellegüknel fogva általános érdeklődésre tarthatnak számot.

A könyv tartalma — két áttekintő, bevezető előadáson kívül — három fejezetre oszlik: Navier—Stokes-féle módszer (5 előadás), szubszonikus áramlások (7 előadás), transzszonikus áramlások (7 előadás) és analitikus módszerek (3 előadás). Az egyes előadások egy-egy speciális áramlástani feladat műszaki-fizikai problematikájával és a numerikus vagy analitikus megoldás metodikájával foglalkoznak. Az így többé-kevésbé szerteágazó problémakör föléelő előadásokat jól foglalja össze egy csokorba T. Cebeci, K. Stewartson és J. H. Whitelaw: „Általános áttekintés” című bevezetője. Ez a 40 oldalas bevezető rendkívül tanulságos összefoglalást és áttekintést ad a problémaköréről. Fejezet-címei: Bevezetés. A Reynolds-átlagolt Navier—Stokes-féle egyenletek és megoldásuk. A Navier—Stokes-egyenletek különböző redukált alakjai. Néhány megoldási módszer. Néhány turbulencia-modell. Szubszonikus áramlások. Transzszonikus áramlások. Analitikus módszerek. Következtetések.

Az irodalom nem az egyes előadások után, hanem a kötet végén található. Nem hiányoznak belőle sem a témára vonatkozó szak- vagy kézikönyvek, sem a speciális feladatokra vonatkozó szak-cikkek.

Noha a kötet bevezetője általános érdeklődésre tarthat számot, speciális tartalmánál fogva a könyv elsősorban aerodinamikai tervező mérnököknek, az áramlástani számítástechnikai módszerekkel foglalkozó fizikusoknak és matematikusoknak ajánlható.

Szabó János

J. A. Essers (ed.): Computational Methods for Turbulent, Transonic and Viscous Flows
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York—Tokyo. 1983

A kötet a Kármán Institut által 1981. március 30. és április 3. között szervezett “Computational Fluid Mechanics” előadássorozat anyagát közli. Az egyes fejezetek, — melyeknek szerzői a témakör jeles európai és tengerentúli művelői, — önálló zárt munkák, egymáshoz nem kapcsolódnak.

Az első fejezet (szerzője R. T. Davis) a vizskózus áramlások véges differenciákkal történő vizsgálatához szükséges rácsponatok koordinátáinak generálását tárgyalja. A koordináta-generálással szemben kirótt követelmény, hogy minimális rácsponatszám mellett a megoldó algoritmus hibáját minimumon tartsa.

Részletesen tárgyalja a poligon geometriájú peremekre alkalmazható Schwarz—Christofel-módszer általánosítását görbült felületű peremekre. A szabad áramvonalú, illetve a cirkulációs áramlások tárgyalása után számos alkalmazási példát találhat az olvasó különböző csatornaáramlások rácsrendszerére (könyök, divergáló, tördeltvonalú csatornákra).

A fejezetet — mint a kötet többi fejezetét is — igen gazdag referenciagyűjtemény zárja.

A második fejezet (szerzője W. Hackbusch) peremértékproblémák numerikus megoldását taglalja. Részletesebben tárgyal egy hatékony iteratív eljárást, melynek jellemzője, hogy egy finomabb és egy durvább rácsrendszerrel egyidejűleg dolgozik (Multi—Grid Algorithm).

Számos FORTRAN programrészlet, folyamatábra nyújt hatékony segítséget az olvasónak. E fejezet további értéke a konvergenciagyorsaságról és a hibaanalízisről írott rész.

A turbulens áramlások szimulációja című fejezet (szerzője J. H. Ferziger) bevezetésként tömör áttekintést nyújt a turbulencia területén jelentkező alapgagymakról, fontosabb elméleti és numerikus vizsgálati módszerekről. A fejezet további része alapvető turbulenciátípusok tulajdonságait tárgyalja majdhogynem minden matematikai apparátus nélkül.

A turbulencia-modellezésnek e kvalitatív leírásai igen olvasmányosak és tanulságosak, azonban a numerikus modellezéshez számottevő segítséget nem nyújtanak.

Az R. I. Issa által írt fejezet két- és háromdimenziós áramlások vizsgálatának numerikus módszereit ismerteti. E bevezető jellegű mű elsősorban kezdőknek ajánlható.

A T. J. Bakertől származó fejezet a hangsebesség környezetébe eső potenciáláramlások numerikus vizsgálati módszereit nyújtja. Számos módszert ismertet a potenciálegyenlet diszkrét differenciálegyenletekké való átirására. A megoldási módszerek ismertetésén túl az egyes iteratív megoldási módszerek konvergenciasebességére és numerikus stabilitására is kitér. Külön értékelendő e fejezetben a közölt numerikus módszerekkel kapott eredmények és a kísérleti eredmények összevetése.

A kötetet E. Dick munkája zárja. Témája az Euler-egyenlet megoldása relaxációs módszerrel hangsebesség körüli stabil áramlásokra. Az ismertetett különböző relaxációs módszerekre egy- és kétdimenziós alkalmazási példát találhat az olvasó. E fejezet hasznosságát növeli a különböző relaxációs módszerek konstrukciójára adott részletes leírás.

E könyvet mind e témakör művelői, mind pedig a kívülálló érdeklődők nagy haszonnal forgathatják.

Szabó János

**Giovanni Gallavotti: The Elements of Mechanics
Springer-Verlag, New York—Heidelberg—Berlin, 1983**

Valószínűleg a mechanika a fizikának az a fejezete, amelyikről a legtöbb tan-, szak- és kézikönyvet írtak. G. Gallavotti könyve kitűnik közülük tartalmának, különösen pedig tárgyalásmódjának az újszerűségével. Íme a fejezetcímek: 1. A fenomenológikus valóság és a modellek. 2. Az egydimenziós mozgásra vonatkozó kvalitatív szempontok. 3. Több szabadsági fokú rendszerek. A kényszerek elmélete. Analitikus mechanika. 4. Speciális mechanikai rendszerek. 5. Disszipatív és konzeratív rendszerek stabilitási tulajdonságai.

A szerző a könyv előszavában hangsúlyozza, hogy a címben szereplő „elemek” szó nem cserélendő össze az „elemi”, még kevésbé a „könnyű” szóval. Valóban: a könyv a mechanikai problémák széles skálájával foglalkozik; közülük egyesek — tárgyalásmódjukkal együtt — elemiek, mások alaposabb matematikai felkészültséget igényelnek. Ez utóbbiak megértését segítik a fejezetek végén található feladatok és problémák, továbbá a felhasznált matematikai tételek bizonyítása a Függelékben.

Hazai elméleti fizikai iskolán nevelkedett fizikus számára a könyv tárgyalásmódja bizonyára szokatlannak tűnik. Az első 150 oldal az egydimenziós mozgások dinamikájával foglalkozik; a Kepler-problémára a 290. oldalon kerül sor... Közben azonban a kanonikus transzformációk, a normálrezgések lenyűgözően szép leírását élvezhette az olvasó.

A szerző nem titkolja: *elméleti* mechanikai tankönyvet kívánt írni. Egyes fejezeteit kezdőknek, más fejezeteit felsőéveseknek szánta.

Bár a szerző a bevezetőben apologizál, amiért helyenként esetleg vét a matematikai egzakttság ellen, egy-két esetben a pontatlanság már szemet szűrő. Így pl. a Coulomb-törvényben szereplő arányossági tényező csak vákuumban univerzális állandó (7. oldal); elméleti mechanikai tankönyvből nem hiányozhat a potenciális energia létezésének szükséges és elégséges feltétele; hiányolható a newtoni mechanika alkalmazhatósági tartományára való — legalább — utalás.

A könyvet azonban nem ezek, hanem érdekes, újszerű felépítése és tárgyalásmódja, a nagy számú, szép és tanulságos feladat és a gördülékeny stílus jellemzik. A recenzens melegen ajánlja minden fizikusnak.

Szabó János

**J. Christiansen (ed.): Hyperfine Interactions of Radiative Nuclei
Springer-Verlag, 1983**

Az előszóból és hat fejezetből álló könyvet több mint 170 ábra teszi szemléletessé, az eligazodást tárgymutató segíti. Gyakorlatilag minden fejezet más szerzőtől származik és különállóan is használható. A kötet egészében a gerjesztett vagy rádióaktív atommagok momentumai és az elektromágneses tér kölcsönhatásával foglalkozik. A hiperfinom kölcsönhatás tanulmányozására alkalmazott kísérleti technika a kérdéses magállapot élettartamától függ, a kölcsönhatás dinamikája a rádióaktív sugárzás térbeli eloszlásának időfüggésében nyilvánul meg. A kísérletek a magnívók felhasadásáról és/vagy eltolódásáról informálnak. A kísérleti eredmények a mag momentumot és a mag helyén levő elektromágneses teret tartalmazó szorzat formájában jelennek meg; és a mag közvetlen környezetéről informálnak. A 60-as évekre a kísérleti technikák kifejlődése, a 70-es évekre az alkalmazások elterjedése a jellemző; ez utóbbi területen részben magfizikai jellemzők, azaz a gerjesztett állapot momentumainak a meghatározása, részben a hiperfinom terek meghatározásán keresztül atomi és szilárdtest tulajdonságok meghatározása volt a cél.

A bevezető J. Christiansen és W. Witthuhn tollából 11 ábrával és 22 irodalmi hivatkozással összegzi a módszertani és történelmi szempontokat.

A második fejezet szerzője G. D. Sprouse (21 ábra, 72 irodalmi hivatkozás) összefoglalja azokat a magfizikai tudnivalókat, amelyek a gerjesztett magállapot mágneses dipól és elektromos kvadrupól momentumának a mérésével kapcsolatosak.

A harmadik fejezetben (24 ábra, 202 irodalmi hivatkozás) O. Hausser és I. S. Towner a szabad atomok és ionok elektronszerkezetére vonatkozó információkat gyűjtötte össze. A hátralevő három fejezet szilárdtestfizikai problémákkal foglalkozik: a negyedikben (47 ábra, 172 irodalmi hivatkozás) E. Rechnagel, G. Schatz és Th. Wichert a fémekben levő rácshibák hiperfinom térre gyakorolt hatásával; az ötödikben (39 ábra, 432 irodalmi hivatkozás) W. Witthuhn és W. Engel a nem köbös szerkezetű fémekben az elektromos térgradiens meghatározásával és végezetül a hatodikban H. Ackermann, P. Heitjans és H. J. Stöckmann (30 ábra, 219 irodalmi hivatkozás) „ β -sugárzók és izomer magok mint a kondenzált anyagok szondái” címmel a mag mágneses rezonancia kísérletek alkalmazásával a β -bomló polarizált magok esetén foglalkoznak.

A könyv nyomdai szempontból kifogástalan, jól olvasható, esztétikus, világos ábrákkal. Tematikája és tartalma alapján kezdőknek és aktív kutatóknak, valamint egyetemi előadóknek ajánlható.

Dr. Tompa Kálmán

**H. Beck, H. J. Güntherodt (szek.): Glassy Metals II
Atomszerkezet és dinamika, Elektron szerkezet,
Mágneses tulajdonságok**

A fenti címmel és alcímmel jelent meg 1983-ban a Springer Kiadó gondozásában a Beck H. és Güntherodt H. J. szerkesztette könyv második kötete, amelyiknek 1981-ben megjelent első kötétéről a Magyar Fizikai Folyóirat már röviden beszámolt. A II. kötet — hasonlóan az előhöz — a Topics in Applied Physics sorozatban, annak 53. köteteként látott napvilágot. Tizenegy fejezet foglalja össze az alcímhez igazodva az üvegfémek fenti tulajdonságait, amit előszó, részletes tartalomjegyzék és tárgymutató egészít ki.

A szerkesztők a könyv harmadik kötetét tervezik arra alapozva, hogy az üvegfémek területe még most is a gyors fejlődés korában van és nem tekinthető lezártnak egyetlen fejezet sem; ezért találhatók átfedések az első két kötetben is. A szerkesztők (lásd: I. Bevezetés) úgy gondolják, hogy szükséges a tudományterület jelen állásainak a rögzítése, jóllehet további fejlődés várható. A két kötetben hiányoznak olyan fejezetek, mint a korrózió, az alkalmazások, az elektronszerkezet elmélete (amit eredetileg a II. kötetbe szántak) és ezek a témák szintén a III. tervezett kötetben lesznek találhatók.

A II. kötet több fejezete foglalkozik az atomszerkezettel és dinamikával. Az ionok elrendeződéséről az amorf anyagban a szórési módszerek informálnak a szórási faktor k térben történő meghatározásán keresztül, vagy a „lokális” módszerek a reális térben történő ion-környezet meghatározásával. Egyik módszer sem képes arra, hogy megadja minden ion koordinátáit a háromdimenziós térben, azaz az ionok három dimenziós teljes elrendeződését. Ezért lényegesek a modell szerkezetek megalkotására vonatkozó próbálkozások, amelyek a feltételezett ion-elrendeződésből mérhető fizikai mennyiségek leszármaztatását célozzák, természetesen a teljes tér ionokkal való lefedésének végső igényével.

A 2. fejezetben Gaskell P. H. 21 ábra és 84 irodalmi hivatkozás alapján 45 oldalon foglalkozik az amorf fémek szerkezetének modellezésével. A modellek természetesen tartalmazzák a számítástechnika nyújtotta lehetőségeket, a szélső esetként számontartott Polk—Bernal és sztereokémiaiilag koordinált egységeken alapuló elképzeléseket, a modellek határait. Úgy tűnik, hogy a korábbi helyzet, amelyben a viszonylag leegyszerűsített modellek is elegendők voltak a kísérletek leírására, megváltozott, a kísérleti módszerek fejlődése (pl. EXAFS) új kihívást jelent a modellalkotók számára is. Jelen ismeretek szerint nincs a modellek között bölcsék köve, tehát olyan modell, ami mindent leír. „A jövő legalább annyira lelkesítő, mint a közelmúlt” fejezi be gondolatait Gaskell.

A 3. fejezetben Sadoc J. F. és Wagner C. N. J. 16 ábrán, 60 irodalmi hivatkozással 42 oldalon tárgyalja a fémüvegek (az eredeti cím szerint!) neutron és röntgendiffrakciós kísérleteit. A fejezet példamutatóan foglalja össze a kísérletek kiértékeléséhez szükséges elméleti alapokat és a különböző üvegfémek sztatikus szerkezetére vonatkozó legújabb eredményeket, beleértve a parciális struktúra-faktorokat, a lokális anizotrópiára vonatkozó információkat és a mágneses ötvözetek rendjét. Az eredmények egyaránt vonatkoznak az átmeneti fém—metalloid és a fém—fém rendszerekre. A szerzők záró gondolatként a „lokális” módszerek és a modellezés szükségességére hívják fel a figyelmet.

A 4. fejezet: Mössbauer spektroszkópia alkalmazása az amorf fémekre (21 ábra, 153 irodalmi hivatkozás, 34 oldal) Gonser M. és Preston R. tollából. Bevezetőként megismerteti a Mössbauer

spektroszkópia alapjaival és az amorf fémek Mössbauer spektrumának jellegzetességeivel. A fejezet első kérdése az atom (ion) elrendeződés és a Mössbauer spektrum kapcsolatát elemzi; a konklúziója:

„Két megoldandó kérdés van:

- a) miként határozható meg kísérletileg a hiperfinom tér valódi eloszlása,
- b) hogyan értelmezendő ez az eloszlás egy egyértelmű szerkezet alapján.”

A fejezet további részét a potenciális alkalmazásokat is segítő mágneses tulajdonságok Mössbauer spektroszkópiájának szentelik a szerzők, a külső mágneses terek hatásának, a feszültségek vizsgálatának.

Az 5. fejezet, Rácshibák és atomtranszport fémüvegekben szerzői Chaudhari P., Spaepen F., Steinhardt P. J. 31 ábrát, 81 irodalmi hivatkozást tartalmaz, terjedelme 42 oldal. Egyértelmű, hogy a rácshibák definíciója és osztályozása és az atom-transzportot előidéző mozgások leírása rendezetlen rendszerekben nehéz feladat, mivel nincs ideális amorf szerkezet, amihez viszonyítva leírható — definiálható a rácshiba. Különösen érdekes a diszlokáció definiálása amorf közegben. A fejezet összegzi a számítógép-szimulációs kísérleteket a pont és vonalhibák szerepével kapcsolatban, valamint az atom-transzporttal kapcsolatos kísérletek eredményeit.

Künzi W. H. írta a fémüvegek mechanikai tulajdonságait összefoglaló 6. fejezetet, 16 ábrával, 126 irodalmi hivatkozással 48 oldalon. Főleg a rugalmas és rugalmatlan tulajdonságokat tekinti át, valamint ezek kapcsolatát az atomi szerkezettel, az atomi dinamikával és más tulajdonságokkal. Mivel a fémüveg szalagok, fóliák és alapra tapadó rétegek formájában állíthatók elő, ezért a szükséges kísérleti technikákat is ismerteti a fejezet. A különböző feszültség-deformáció sajátságoknak megfelelően csoportosítja mondanivalóját a szerző. A magnetoelasztikus tulajdonságok ismerete különösen fontos az alkalmazások szempontjából. A rugalmas válasz hőmérséklet és frekvencia függésének ismerete a mikroszkopikus relaxációs folyamatokba enged betekintést.

A rugalmatlan neutronszerzési kísérletek eredményei (7. fejezet szerzői Suck J. B., Rudin H., 16 ábra, 121 irodalmi hivatkozás, 44 oldal) a fémüvegek ionjainak vibrációs mozgásáról nyújtanak értékes információkat. Az eredmények értelmezésénél ismét találkozunk azzal a nehézséggel, amit a hosszútávú atomi rend, azaz a translációs szimmetria hiánya jelent. Mindazonáltal a vibrációs állapotsűrűség és a kollektív módusok diszperziójának speciális tulajdonságai sikerrel értelmezhetők. Összefoglalják az atomi vibrációk termodinamikai tulajdonságokra gyakorolt hatását.

A 8. fejezet „Lézeres gyorsítás” kivételnek tekinthető, ugyanis a többitől eltérően egy üveg-fém előállítási technológiával és annak eredményeivel foglalkozik, szerzője van Allmen M., 10 ábrát, 37 irodalmi hivatkozást tartalmaz 21 oldalon. Eltérően az általában használt gyorsítási technológiáktól (üllő-kalapács, gyorsforgó korong különböző változatai) a lézeres gyorsítás hűtőközege ugyanaz az anyag, mint az üvegfémmé váló ötvözet, pontosan azonos anyagú felületi zománczsról van szó, 10^{10} K/s hűtési sebesség érhető el, megközelítően három nagyságrenddel nagyobb, mint a szokásos technológiák esetén, és ez a tény egy sor újabb üveg-fém előállítását, vizsgálatát és alkalmazását teszi lehetővé.

Az elektrontranszport és elektronszerkezet kérdéseivel foglalkozik a 9. és 10. fejezet. A 9. fejezet (Oelhafen P. szerző, 36 ábra, 70 irodalmi hivatkozás, 36 oldal) az üveg-fémek elektronspektroszkópiájával foglalkozik. Mivel nagyon sok fizikai tulajdonság, pl. elektron fajhő, ferromágnesség, szupravezetés függ az elektron állapotsűrűségtől, ezért kulcsfontosságú fizikai mennyiség. A szerző összefoglalja az üveg-fémek különböző családjaira vonatkozó elektronspektroszkópiai eredményeket, továbbá az elektronszerkezet és kötés, elektronszerkezet és stabilitás közti kapcsolatot szintén elemzi.

Harris R. és Strom—Olsen J. O. a 10. fejezetben (7 ábra, 95 irodalmi hivatkozás, 18 oldal) a fémüvegek alacsony hőmérsékleti transzport tulajdonságaival foglalkozik beleértve a termofeszültség, Hall-effektus és mágneses ellenállás eredményeket is. A fejezet nagy része az elektromos ellenállás alacsony hőmérsékleti anomáliájával foglalkozik. A Kondo-effektushoz hasonló anomália induláskor azonos magyarázatra vezetett. Amikor a mágneses tértől, illetve mágneses állapottól való függetlenség kiderült, más magyarázat — az amorf szerkezet bizonyos sajátosságait felhasználó — született. A szerzők véleménye: nincs egyértelmű magyarázat, további munka szükséges.

A záró fejezet Durand J.-től a fémüvegek mágneses tulajdonságairól szól (10 ábra, 235 irodalmi hivatkozás, 43 oldal). A mágneses tulajdonságok alap és alkalmazott kutatás szempontjából is fontosak és szerteágazók. A fejezet célkitűzése korlátozza a bemutatás lehetőségeit. A mágneses tulajdonságok inhomogenitásának és a mágneses mérésekből a szerkezetre levonható következtetéseknek szenteli a fejezet első részét a szerző. A második részben a szerkezeti rendezetlenség mágneses tulajdonságokra gyakorolt hatásával, a ritka földfémeket tartalmazó fémüvegekkel foglalkozik. A záró gondolat itt is a még elvégzendő feladatokat tartalmazza.

A könyv kivételre gondos, világos szerkesztés, jó olvashatóság jellemzi, minden fémüveg után érdeklődő szakembernek, kutatónak, oktatónak melegen ajánlható.

Dr. Tompa Kálmán

**Reiner Behrisch: Sputtering by Particle Bombardement II
Springer, 1983**

R. Behrisch a Max Planck Institute für Plasmaphysic, Garching b. München plazma-fal kölcsönhatás projekt vezetője. E laboratórium a részecske-porlasztási kutatások egyik világcentruma. A kötet I. része 1981-ben jelent meg, amely az elemek ionporlasztásával foglalkozott Sigmund, Robinson, Andersen, Bay, Rosendaal tollából.

A II. kötet a reális rendszerek, fontos alkalmazások válogatott problémáikájával foglalkozik, mindig a legilletékesebb szerzők, a legnagyobb iskolák összefoglalásában. A fejezetek nem képeznek egységet, az összeállítás kis 30—70 oldalas monográfiák sorozata: Áttekintés: — Több komponensű rendszerek porlasztása. — Kémiai porlasztás. — Porlasztás elektronokkal és fotonokkal. — Szilárdtestek porlasztása neutronokkal. Felületi topográfia kialakítása nehézion-bombázással. — Felületi topográfia kialakulása gázion implantáció hatására.

Az egyes cikkek magasszínvonalú review-k, 1982-ig aktuális áttekintéssel, sok mérési adattal.

A felületi analitika és a félvezető technika alkalmazóinak igen hasznos könyv.

Dr. Giber János

**H. P. Weber, W. Lüthy (eds): Laser Spectroscopy VI
Springer Series in Optical Sciences 40**

Hogyan szalad az idő! Ismét elmúlt egy év, ismét elmúlt, a most VI., Lézeres Spektroszkópiai Konferencia, melyet ezúttal Interlaken-ben Svájc-ban rendeztek meg, 1983 június 27 és július 1 között. No és ismét kezünkben tarthatjuk a konferencia proceeding-jét gyönyörű kötésben, az "Optical Sciences" sorozat 40. köteteként.

Mivel én harmadik alkalommal adhatok hírt e konferencia proceeding-jéről, (a III-tól kezdve publikálja a Springer), nem szeretnék ismétlésekbe bocsátkozni. Véleményem azonos az előző évekével, melyek a korábbi számokban megtalálhatók.

Engedtessek meg ez alkalommal, hogy kis plágiummal, nagy tudású külföldi referáló kollégáim véleményét a magaméval megtoldva néhány szót ejtsek a hasonló jellegű kiadványokról.

Közismert, hogy a proceedingek anyaga előbb-utóbb (inkább előbb) megjelenik a szakfolyóiratokban. Ott persze tisztességes formában. Az ilyen kötetekből a kívülálló nem meríthet hasznos tudást, mivel nem elég alaposak az itt közölt „kibővített abstractok”. Ugyanakkor a szakemberek is keveset kapnak, hiszen a szerzők a poént rendszerint elhallgatják, a konferenciára tartogatják, már ha egyáltalán tudták az abstract megírásakor.

Érdekes, hogy külföldi (nyugati) vélemény, miszerint: egy ilyen könyv túl kemény kötésű és túlságosan drága ahhoz, hogy hivatását betölthesse. A konferencián kényelmetlen cipelgetni, ha egyáltalán elkészül a megnyitóra, otthon meg nem érdekes forgatni.

Kis jóakarattal egy tematikus cikkgyűjteménynek tekinthetnénk, ami a konferencia témájának új eredményeit átfogja, de ez sem igaz. Ma már elég nehéz egy kellő létszámú konferenciát összehozni a gazdasági világ bajok miatt, így sokszor a tematikát alakítják a fizetőképes jelentkezők előadási szándékaihoz. Hát itt is ez történt. Érdekes a bevezető tematikáját a tartalomjegyzékkel egybevetni, s azonnal kiderül.

Több javaslatához csatlakozva én is lebeszelném a Springert e „hagyomány” folytatásáról, de a magyar kiadókat rábeszelném, nézzék már meg, hogyan csinálnak ilyen gyorsan ilyen szép könyvet. Másutt hasznos lehet.

Horváth Zoltán György

Y. Ohnuki and S. Kamefuchi: Quantum Field Theory and Parastatistics

Az elemi részecskékről fel szoktuk tenni, hogy vagy Fermi—Dirac, vagy Bose—Einstein statisztikát követnek, és ezt a tapasztalat eddig minden esetben igazolta. Ez még nem teszi tárgyalanná a kérdést, vajon léteznek-e a természetben eddig még fel nem fedezett részecskék, melyek más statisztikát, ún. parastatisztikát követnek. Elméleti síkon azt kellett elsősorban megvizsgálni, vajon a kvantummechanika — vagy, általánosabban a kvantumtérelmélet — és a relativitáselmélet elveivel összeegyeztethető-e a parastatisztikák léte. Ilyen kutatások az ötvenes évektől kezdve folynak, és a könyv szerzői maguk is önálló eredményekkel járultak hozzá a parastatisztikák elméletének kidolgozásá-

hoz. Monográfiájukban a parastatisztikák elméletének szisztematikus kifejtését adják. A mintegy 500 oldalas mű 27 fejezetből áll és az alábbi 5 részre oszlik:

Parakvantálás; Nemrelativisztikus térelmélet (egy paratér esetében); Nemrelativisztikus térelmélet (több paratér esetében); Relativisztikus térelmélet; Kapcsolódó Problémák. Az egyes részekben belül a szerzők kimerítő részletességgel és igényes matematikai apparátussal tárgyalják a témát. Így pl. a második részben egy-egy fejezetet szentelnek a de Broglie tér kvantálásának, az állapotvektor tulajdonságainak, a megfigyelhető mennyiségek struktúrájának, a mértékcsoportoknak és a rejtett paramétereket tartalmazó térrel való kapcsolatnak.

Mivel parastatisztikát követő elemi részecskéket egyelőre nem fedeztek fel, a könyv — melyben mindössze egy 10 oldalas fejezet foglalkozik az esetleges részecskefizikai alkalmazásokkal — első sorban matematikai beállítottságú, az axiomatikus építkezést kedvelő kutatók érdeklődésére tarthat számot.

Frenkel Andor

**A. Bianconi, L. Iucoccia and S. Stippich (eds): EXAFS and Near Edge Structure Spectroscopy
Proc. of the Int. Conf. Frascati, Italy, Sept. 13—17, 1982
Springer-Verlag, 1983**

A röntgen abszorpciós spektroszkópia, mint anyagvizsgálati lehetőség a 70-es évek közepén indult látványos fejlődésnek, miután felismerték, hogy a szinkrotron sugárzás ideális, folytonos spektrumú sugárzást nyújt az ilyen munkákhoz. Első lépésként az EXAFS (Extended X-ray Absorption Fine Structure), a röntgen abszorpció él kiterjedt finomszerkezete, jellegzetes oszcillációiról mutatták meg, hogy ezek a fotoelektronok egyszeres szóródásával értelmezhetők és az atomok közeli rendjével összefüggő anyagszerkezeti információkat hordoznak. Az abszorpció él közelében megjelenő hasonló, oszcilláló szerkezet a XANEX (X-ray Absorption Near Edge Structure) — amely az él nagy-energiájú oldalán mintegy 40 eV-ig terjed — már több fejtörést okozott, mert az erősebb kölcsönhatás miatt itt a fotoelektronok többszörös szóródásával kell számolnunk. Az első sikeres eredmények 1980-ban jelentek meg. Kiderült, hogy az EXAFS és XANEX tartományok információ tartalma jól kiegészíti egymást. Amíg az előbbi lényegében a pár- kölcsönhatások függvénye, az utóbbit az adott atom körüli több (2—3) koordinációs héj szerkezete határozza meg.

A kézikönyvekben minderről ma még keveset találunk és mindkét terület a kutatás számára jórészt kiaknázatlan. Érthető érdeklődés fogadta tehát az olaszországi Frascati-ban 1982-ben megrendezett első ilyen témájú nemzetközi konferenciát, és az ennek előadásait összefoglaló kiadványt.

A Springer Series in Chemical Physics 27. köteteként megjelent mű összesen 95 előadás anyagát tartalmazza. Tartalmukról az alábbi fejezetcímek is adnak némi felvilágosítást.

1. Az EXAFS és XANES elméleti kérdései (8 előadás)
 3. EXAFS adatok kiértékelése (13 előadás)
 3. XANES (15 előadás)
 4. Sajátos kristályszerkezetek (14 előadás)
 5. Folyadékok és rendezetlen szerkezetek (14 előadás)
 6. Katalizátorok (9 előadás)
 7. Biológiai rendszerek (8 előadás)
 8. Kiegészítő módszerek: anomális szórás (4 előadás)
 9. Kiegészítő módszerek: elektron energia veszteség (4 előadás)
 10. Kísérleti eszközök (5 előadás)
- (Mіндеzt bevezetésként egy történeti összefoglaló egészíti ki.)

Konferencia anyagról lévén szó, a témakör egységes és többé-kevésbé zárt tárgyalását nem várhatjuk el, de feltételezhetően a gondos előkészítés eredményeképpen — a kötetben közölt tanulmányok meglehetősen egységes anyagáá álltak össze, és nagyon sok hasznos információt nyújtanak. Érdekes ezek közül néhányat külön is megemlíteni.

- A többszörös szórás figyelembevételével lehetőség nyílik kötési szög meghatározására is EXAFS adatok alapján, ha az nagyobb 100°-nál.
- Híg ötvözetekben az ötvöző atom közvetlen környezetének vizsgálatára egyedülálló lehetőséget nyújt az EXAFS. Így többek között megállapították, hogy a szennyező atomok körüli első szomszédok távolságának, az átlagos első szomszéd távolságától való eltérése számottevően nagyobb, mint ami a Vegard-törvény és a kontinuum elmélet alapján várható.
- Számos munka foglalkozott a különféle oxid-hordozókon diszpergált fém katalizátorok vizsgálatával; 5 fém „cluster”-ek szerkezetével. Figyelemreméltó megállapítás, hogy a kétféle, egymás-

ban nem oldódó fém tartalmazó rendszereknél (pl. Ru—Cu(SiO₂), az egyik fém atomjai gömbszerű héjként veszik körül a másik fémből álló belső magot. A katalizátorok vizsgálata terén egyébként a használatban levő katalizátorok vizsgálatáról várnak fontos új eredményeket. Ehhez azonban rövidíteni kell a mérési időt.

- A biológiai rendszerek vizsgálata a különféle fém ionok környezetéről ad információt. Így többek között megmutatták, hogy a kalcium környezete a csontban más mint az apatitban.
- Szinkrotron sugárforrás, fókuszáló monokromátor és helyzetérzékeny detektor egyidejű alkalmazásával a mérési idő ms nagyságrendűre csökkenthető. Ez jó lehetőséget kínál kinetika mérésekre is. Lézerrel gerjesztett impulzus röntgenforrással a ns-on tartományt is elérhetőnek vélik.

Végül is kinek ajánljuk a könyvet? Az EXAFS és XANES mérésekkel rendszeresen foglalkozók, az irodalmat követve, bizonyára előbb-utóbb minden eredményt megtalálnak a folyóiratokban is, de nem utolsó szempont az sem, hogy a kötet meglehetősen friss anyagot fog össze. Mégis, hogy első-sorban azok számára jelenthet sokat ez a kötet, akik számára az abszorpciós spektroszkópia egy a lehetséges sok alkalmazásra váró módszer közül. Ahhoz, hogy a vizsgálat számára a kérdést jól meg tudjuk fogalmazni, ismernünk kell a módszerek lehetőségeit és korlátait. A szerzők nagy többsége is láthatólag ennek elősegítését tartotta szem előtt, úgy vélem eredményesen.

Zsoldos Lehel

V. E. Zuev and I. E. Naats: Inverse Problems of Lidar Sensing of the Atmosphere
Springer Series in Optical Sciences, Volume 29
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1983

A könyv a „lidar-módszernek” a légköri kutatásokban való alkalmazási lehetőségeivel és azok eredményeivel foglalkozik. A „lidar-módszer” (a lidar szó az angol light detecting and ranging kifejezés rövidítése) alatt az atmoszféra vizsgálatának olyan módszerét értjük, melyet egy lézer- és radar-elven alapuló műszerrel végzünk, s egy ilyen műszernek a meteorológiai kutatásokban való alkalmazása lehetővé teszi, hogy fényalábok visszaverődésével sűrűbb légrétegeket, és egyéb sűrűség inhomogenitásokat fedezzünk fel.

A lézerekkel végzett légköri kutatások már közvetlenül az első lézerek megjelenése után sokat ígérőnek mutatkoztak. Ennek az az oka, hogy a meteorológiai vizsgálatok során alkalmazott konvencionális módszerek nem teszik lehetővé a megbízható, hosszútávú időjárási előrejelzések elkészítését, továbbá nem adnak pontos információt az ipari tevékenység által okozott légszennyeződés mértékéről.

Az atmoszféra lidar-módszerrel való tanulmányozásánál az aeroszol által okozott fényszóródás a legszélesebben alkalmazott jelenség. Ez mindenekelőtt lehetővé teszi az atmoszférikus aeroszol eloszlásának, valamint mikrofizikai paramétereinek a vizsgálatát. E fontos feladat mellett, az aeroszol nyomként is szolgál a különböző légköri paraméterekről kapandó információkhoz, így a lidar-módszer alkalmazható a légköri nedvesség profilok, valamint egyéb, molekuláris profilok meghatározására, továbbá a szélesség és a légköri turbulencia jellemzőinek mérésére is.

Mivel az aeroszolnak nagyon fontos szerepe van a sugárzási átvitelben, beleértve a légszennyeződést is, a Szovjet Tudományos Akadémia Légköri Optikai Intézetében kiterjedt vizsgálatokat folytattak a lidar-módszer meteorológiai alkalmazását illetően. Ez a könyv az Intézetben az utóbbi évtized folyamán végzett elméleti és kísérleti kutatások legfontosabb eredményeit foglalja össze. A könyv öt fejezetből áll. Az első fejezet a bevezetés. A második fejezet a többszörösen szétszórt aeroszol rendszerek optikai érzékelésének általános elméletével foglalkozik. Részletesen analizálja azt a függvénykapcsolatot, mely a szétszórt anyag optikai jellemzői és mikrofizikai paraméterei között áll fenn.

A harmadik fejezet a többfrekvenciás lidar érzékelés elméletét mutatja be, mely lehetővé teszi, hogy több információt szerezzünk az aeroszol mikrofizikai paramétereiről. A fejezet tartalmazza a módszernek néhány alkalmazását különböző gyakorlati problémák megoldására, s bemutatja a három-frekvenciás lidar érzékelés eredményeit a troposzférikus és sztratoszférikus aeroszol mikrosztrukturális paramétereire vonatkozóan.

A negyedik fejezet többek között a lidar-válaszok polarizációs jellemzőinek alkalmazási lehetőségeivel foglalkozik, mely lehetővé teszi a légköri aeroszol kémiai összetételének a meghatározását. Ennek óriási jelentősége van a légszennyeződés vizsgálatában, valamint a lidar válaszok polarizációs jellemzőiből következtetni lehet az aeroszol részecskék alakjára és térbeli orientációjára is.

Az ötödik fejezet összefoglalja a különböző atmoszférikus paraméterek meghatározására vonatkozó módszereket és azok eredményeit, továbbá bemutatja a különböző abszorpciós lidar-módszereket és azok alkalmazásait a légköri vízpára és ózonprofilok érzékelésére. Ezen túlmenően a fejezet

részletesen diszkutálja a lidar-módszer lehetőségeit a légköri nedvesség, homérséklet, szélsébség és a turbulencia vizsgálatában.

A könyvet igen jól használható irodalomjegyzék egészíti ki. A könyvet elsősorban meteorológusok, környezetvédelemmel foglalkozó kutatók számára ajánlhatjuk, de minden bizonnyal fel fogja keltetni a lézertechnika és annak alkalmazási lehetőségei iránt érdeklődő szakemberek figyelmét is.

Pap Judit

**M. Kubicek, M. Marek: Computational Methods in Bifurcation Theory
and Dissipative Structures
Springer Series in Computational Physics**

Ha egy rendszerbe kívülről energia áramlik, akkor térbeli vagy időbeli szerkezetek alakulhatnak ki benne. Ezeket nevezik a modern fizikában disszipatív struktúráknak. Megjelenésük igen széleskörű, előfordulnak egészen különböző szintű biológiai rendszerekben, lézerfizikában, plazmafizikában, a mechanika rugalmas stabilitási problémáiban, turbulenciához vezető hidrodinamikai instabilitásokban, elektromos hálózatokban, kémiai folyamatokban.

Az ilyen rendszereket leíró matematikai modellek általában nemlineáris, közönséges vagy parciális differenciálegyenleteket tartalmaznak, melyekben néhány jellegzetes paraméter is szerepel. A legfontosabb gyakorlati és elméleti probléma az, hogy függnek a megoldások a paraméterektől, és főleg, hogy a paraméterek milyen értékeinél jelennek meg minőségileg új típusú megoldások, mint pl. új stacionárius állapotok, oszcillációk, kaotikus állapotok. A paraméterek ilyen értékeit nevezzük bifurkációs pontoknak, vizsgálatukkal a bifurkációelmélet foglalkozik. Az oszcilláló és a stacionárius megoldások paraméterfüggésének vizsgálatára és a bifurkációs pontok meghatározására leginkább numerikus módszerek használhatók. A könyv ezeket tárgyalja nagy részletességgel. Kézikönyvként használhatják tanulók és kutatók, de gyakorlati szakemberek is, akik bonyolult nemlineáris rendszerek megoldásán dolgoznak. A mai számítógép kapacitás lehetővé teszi a leírt algoritmusok alkalmazását.

Az 1. fejezet a numerikus eljárásokat mutatja be különböző nemlineáris rendszereket leíró modelleken. Itt ismerhetjük meg az alapvető fogalmakat, mint pl. a megoldások stabilitása, multipllicitása, határciklus, különös (kaotikus) attraktor, bifurkációs diagram. A 2. fejezet az általában közönséges differenciálegyenletekkel, a 3. fejezet a parciális differenciálegyenletekkel leírható rendszerekre vonatkozó módszereket tárgyalja. A 4. fejezet az előzőek eredményeit mutatja be példákon keresztül. Az 5. fejezet rövid összefoglalás, valamint (a függelék c. pontjával együtt) utalás a legújabb eredményekre. A függelék A és B pontja FORTRAN nyelven megírt algoritmusokat tartalmaz.

Gálfi László

**F. J. Yndurán: Quantum Chromodynamics
Springer kiadó, 1983**

A könyv szerzője a madridi egyetem elméleti fizikai tanszékének tanára. Korábban, többek közt, különböző axiomatikus elemi rész modellek kereteiben érvényes, úgynevezett egzakt tételek bizonyításával foglalkozott. Jelen műve az utóbbi évtized elemirész fizikájának talán legtöbbet ígérő ágával, a kvantum színdinamikával (k. sz.) foglalkozik.

A monográfia öt fejezetre tagolódik és terjedelme, a nem túlságosan részletes tárgymutatóval együtt 227 oldal.

Az első fejezet röviden ismerteti a k. sz. megszületésének történetét, majd összefoglalja a továbbiakban szükségesnek ítélt kvantumtérelméleti ismereteket, nevezetesen a perturbációs sorfejtést, a Green függvényeket, az időrendezett és normálszorzatot és a Wick tételt.

A második fejezet a k. sz. kiépítésével foglalkozik. Ismerteti a Yang—Mills elmélet alapjait, a kovariáns és nem kovariáns mértékekkel kapcsolatos tudnivalókat. Bevezeti a szellem tereket, tárgyalja a kanonikus kvantálást, a Ward—Szlavnov azonosságokat, a dimenziós regularizálást, minimális levonási sémát, majd az egyhurok közelítés renormálását és az elmélet általános renormálhatóságát. A fejezet a k. sz. globális szimmetriáival, a megmaradó áramokkal és az aszimptotikus szabadság tárgyalásával zárul. A könyv további fejezetei tulajdonképpen már az elmélet alkalmazásait tartalmazza. A harmadik fejezet a mélyen rugalmatlan, az inkluzív és az exkluzív folyamatokkal, a kapcsolódó szerkezeti függvényekkel, a renormálási csoportnak és a k. sz. momentum egyenleteinek kap-

csolatával foglalkozik. Említést tesz a tiltott bomlásokról, a Drell—Yan folyamatokról és a nagy tranzverzális impulzusú hadronszórásokról.

A negyedik fejezetben a részlegesen megmaradó áramokról, a királis invarianciáról, a kvarkok és hadronok tömegéről a π^0 bomlásról, a gluon anomáliáról és a k. sz. vákuumállapotának tulajdonságairól esik szó.

Az ötödik fejezet a k.sz.-ban alkalmazott nem perturbatív módszereket tárgyalja. Először a Feynman-integrálok módszerét, majd a WKB módszert és a kettő kapcsolatát világítja meg. Beszél a funkcionál formalizmusról, az euklideszi k. sz.-ról, az instantonokról és érintőlegesen említést tesz a mostanában divatos konkrét nemperturbatív számolásokról; a rács k. sz.-ról az $\frac{1}{N}$ kifejtésről, a zsák modellekről.

A kilenc részes függelék a térelmélet, a csoportelmélet és speciálisan a k. sz. számos formuláját tartalmazza.

A könyv — a szerző állítása szerint — konzisztens, ám ez nem igaz: a bizonyítások hézagosak és sokszor speciális esetekre vonatkoznak. A k. sz. ismerői számára a mű összefoglalást ad, de belőle az elmélet nem sajátítható el. Az első fejezetben felidézett ismeretek a könyv megértéséhez nem elégségesek, sőt még a többször idézett Bogoljubov—Sirkov könyvben foglaltakhoz is hozzá kell a speciális k. sz. irodalomból olvasni. A dimenziós regularizálás prezentációja például kifejezetten értelmetlen. A témával foglalkozó kísérleti fizikusoknak a mű igen keveset mond. A szövegben zavaróan jelentkezik helyütt-helyütt az, hogy a szerző nem angol anyanyelvű és nincs tisztában az angol nyelv szabályaival sem. A nagy hírű kiadó ennél sokkal jobb összefoglaló műveket szokott megjelentetni.

Sebestyén Ákos

**Magnetic Phase Transitions M. Ausloos and R. J. Elliott (eds)
Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York, Tokyo, 1983**

A Springer kiadó Szilárdtestfizikai sorozatának 48. köteteként jelent meg a Mágneses fázisátalakulások c. könyv, amely tulajdonképpen az olaszországi Erice-ben 1983. nyarán tartott iskola anyagát tartalmazza.

A fázisátalakulások a fizikai jelenségek rendkívül fontos osztályát képviselik, egyrészt kiterjedt gyakorlati alkalmazásai, másrészt a velük kapcsolatban felmerülő alapvető elméleti kérdések miatt. A rendkívül aktuális könyv három részre tagolódik.

Az első rész a téma tárgyalásához szükséges alapvető elméleteket és módszereket ismerteti. Elliott fenomenologikus szemszögből vizsgálja a témát, megmutatja, hogy lehetséges a kooperatív rendszer leírása mikroszkopikusan, egyszerű hamiltoniánból kiindulva, míg a makroszkopikus, a szabadenergián alapuló leírás jelenti a másik kiindulópontot. A két módszer közti hidat a statisztikus mechanika jelenti, amikor a hamiltoniánból aktuális kritikus mennyiségeket vezet le. Az „itinerens” mágnesség eredete és következményei körül még nem ülték el a viták, de Edwards előadásából kiderül, hogy a kísérleti eredmények hatására már kezd kialakulni egy általánosan elfogadható kép. Különleges figyelmet érdemelnek a magasabbrendű kritikus pont körüli jelenségek, — ezeket Honreich elemzi.

A fázisátalakulások alap gondolatai a Landau elmélet alapján megérthetők, de csak a renormalizációs csoportelméletek modern technikája tette lehetővé, hogy a kritikus jelenségek részleteit is megértsük. Ezekbe Stinchcombe, Riedel és Newmann vezetik be az olvasót.

A könyv második része az időfüggő és nem-egyensúlyi tulajdonságokkal foglalkozik. Buyers foglalja össze a spin dinamikát, spin hullámokat, beleértve a nem-lineáris spin- és szoliton mozgást is. Ausloos a fémek mágneses fázisátalakulásai közelében, de külső mágneses tér nélkül végbemenő elektron-transzport jelenségeket írja le. Mazenko kétdimenziós, Ising-szerű rendszerek kritikus dinamikáját vizsgálja, elsősorban a másodrendű fázisátalakulások közelében. Gunton az elsőrendű fázisátalakulások kinetikájával, metastabil és instabil rendszerekkel, a spinodális bomlás lineáris és nem-lineáris elméletével foglalkozik. Ezek a fejezetek természetesen a mágneses fázisátalakulásokon túlmutatva a jelenségek más csoportjaira is érvényesek.

A harmadik rész rendezetlen rendszerekkel foglalkozik. A rendezetlen mágneses anyagok (spinűvek, amorf féművek, híg mágneses anyagok, véletlenszerű ötvözetek és anizotrópiák) elméleti és kísérleti jelentősége rendkívül nagy, mivel ideális alapot jelentenek általános koncepciók kipróbálására és ellenőrzésére. De Jongh számbaveszi a lokálisan rendezetlen mágneses rendszerek statisztikus termodinamikai tulajdonságait, bevezeti a perkoláció, frusztráció és szolitonok fogalmát, ezek különleges szerepét a mágneses fázisátalakulásokban. Coniglio a perkoláció híg mágneses rendszerek-

ben témáját tárgyalja. Az utóbbi évtizedben rengeteg erőfeszítést fordítottak a spinűvegekre, ennek ellenére a probléma alapjainak megértése még mindig várat magára, ugyanis ehhez át kell lépni az egyensúlyi termodinamika határait, állapítja meg Grest, ugyanakkor a kísérleti adatok meglepően jól illeszkednek a szabadenergia felület tulajdonságait leíró modellbe. Az amorf féművegek mágnességének hatalmas irodalmát, az anyagok és tulajdonságaik nagy változatosságát Rhyne foglalta össze.

A kötet a mágneses fázisátalakulások elméletének naprakész összefoglalója, a tárgyalt témák sokoldalú megközelítése alapján. Nemcsak fémfizikusoknak, hanem a termodinamika, a statisztikus fizika és határterületek művelőinek is ajánlható.

Pardaviné Horváth Márta

V. N. Popov: Functional Integrals in Quantum Field Theory and Statistical Physics
A Mathematical Physics and Applied Mathematics sorozat 8. kötet
D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, Boston, Lancaster, 1983

A modern elméleti fizikában fontos szerep jut a funkcionálintegráloknak. Az ismertetett könyv áttekintést ad azokról a kvantumtérelméleti és statisztikus fizikai problémákról, amelyeket funkcionálintegrálok segítségével célszerű megfogalmazni. A formalizmus természetes keretét nyújt a megoldás különböző módszereihez, noha a használt eljárások matematikai szempontból korántsem tekinthetők szigorúnak. A funkcionálintegrált Feynman először egyszerű klasszikus mechanikai rendszerek kvantálása végett vezette be a szokásos, operátorokat használó megfogalmazás alternatívájaként. A módszer igen alkalmasnak bizonyult sok szabadsági fokú rendszerek esetén perturbációs számítás, diagramtechnika kidolgozására. A könyvben számos olyan eljárással találkozunk, amelyek segítségével a naív perturbációs számítás során fellépő szingularitások kezelhetővé válnak, mint a perturbációs sorok közvetlen átrendezése, a regularizálás, a renormálási transzformáció. Az egyes fejezetek általában önálló egységek, nem feltétlenül szükséges egymás után olvasni azokat. Az ismertetett módszerek sokfélesége, s a funkcionálintegrál szerteágazó alkalmazására bemutatott példák nagy száma azonban igen tömör tárgyalásmóddal párosul. Ezért a témakörben járatlan olvasó számára a részletek megértése nem könnyű. A szakembernek viszont a kötet megfelelő fejezeit hasznos emlékeztetőként ajánlhatók.

A könyv elején a kvantummechanika pályaintegrál formalizmusáról olvashatunk, olyan esetben is, amikor funkcionálintegrálokat a fázistérbeli kényszerfeltételek figyelembevételével kell kiértékelni. A kvantumtérelméleti perturbációs számítással az önkölcsönható skaláris részecske példáján ismerkedhetünk meg. Ezután a kvantum statisztikus fizikában használatos hőmérsékleti Green-függvények és a diagramtechnika bevezetésére kerül sor. Mértékterekre a funkcionálintegrál formalizmusa lehetővé teszi a mértékinvarianciát figyelembe vevő, kovariáns perturbációs számítás felépítését, mint azt az elektromágneses tér, a Yang—Mills-tér és a gravitációs tér esetén láthatjuk. Szó esik továbbá az elektromágneses és gyenge kölcsönhatás Weinberg-féle, illetve Fagyjev-féle egyesített elméletéről. Külön fejezetet szentel a szerző az elektromágneses térrel kölcsönható elektron Green-függvénye aszimptotikus viselkedése meghatározásának kis hullámszámok mellett, s ezután tárgyalja részecskék nagyenergiájú szóródását az eikonál közelítést használva.

Az első részletesen vizsgált soktestprobléma a szuperfolyékony Bose-rendszer. A perturbációs számítás bemutatását és annak a kis sűrűségű Bose-gázra való alkalmazását követően a perturbációs számítás módosított változatáról olvashatunk, amelynek segítségével a Green-függvények infravörös aszimptotikus viselkedése kiszámítható. Ezután kerül sor a hidrodinamikai Hamilton-függvény mikroszkopikus leszámaztatására, majd alacsony dimenziós, Bose-kondenzációra nem képes rendszerek szuperfolyékony állapotát, valamint a kvantált örvényeket vizsgálva a szerző. Terjedelmes részt szentel a kondenzációra képes Fermi-rendszerek elméletének is. A szupravezető állapotra használatos, módosított perturbatív elmélet és a másodfajú szupravezetés ismertetése után a Fermi-rendszer kollektív, Bose-típusú gerjesztéseiről s végül a He^3 szuperfolyékony állapotairól esik szó. Töltött fermionok rendszerére is alkalmazható a funkcionálintegrál formalizmusa, melynek keretében a plazma hidrodinamikai egyenletei a mikroszkopikus modellből leszámaztathatóak, s a plazmarezgek spektruma számítható. A kétdimenziós Ising-modell egzakt megoldására kidolgozott eljárások közül azt tárgyalja a szerző, amely során funkcionálintegrált használva véges rendszer állapotösszege is meghatározható. A statisztikus fizikai problémák sorát a másodfajú fázisátalakulások Wilson-féle elméletének tömör áttekintésével zárja.

Az utolsó fejezet az erősen kölcsönható részecskék leírására bevezetett kvantált örvény típusú gerjesztésekkel foglalkozik.

Györgyi Géza



A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó és Nyomda főigazgatója
Műszaki szerkesztő: Sándor István
A kézirat a nyomdába érkezett: 1984. október 3. — Terjedelem: 11,20 (A/5 ív)
84-3960 — Szegedi Nyomda — F. v.: Dobó József igazgató

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA



TARTALOMJEGYZÉK

<i>Torma Tibor</i> : Fotonkeltés a Higgs-bozon bomlásaiban	1
<i>Hudetz Antal és Monos Emil</i> : Az artériafal anizotrop rostszerkezetének nemlineáris modellje	63
<i>Groma István</i> : Plazmaszóró berendezésekhez alkalmazható diagnosztikai módszerek	85

KÖNYVISMERTETÉS

<i>Landolt—Börnstein</i> : Magnetic and Other Properties of Oxydes and Related Compounds	101
<i>Landolt—Börnstein</i> : Physics of Non-Tetrahedrally Bonded Elements and Binary Compounds I.	101
<i>Landolt—Börnstein</i> : Molecular Constants	102
<i>Landolt—Börnstein</i> : Radicals Centered on N, S, P and Other Heteroatoms. Nitroxyls	103
<i>Landolt—Börnstein</i> : Technology of Si, Ge and SiC	104
<i>A. A. Csernov et al.</i> : Modern Crystallography III. Crystal Growth	104
<i>Szabó György</i> : Szuperionos vezetők	105
<i>Yu. I. Shokin</i> : The Method of Differential Approximation	105
<i>I. A. Kunin</i> : Elastic Media with Microstructure II	106
<i>F. Yonezawa and T. Ninomiya</i> : Topological Disorder in Condensed Matter	107
<i>W. Glöckle</i> : The Quantum Mechanical Few—Body Problem	107
<i>Carl Nordling—Jonny Österman</i> : Physics Handbook	108
<i>Harald Fritzsch</i> : Vom Urknall zum Zerfall	108
<i>J. Weidmann</i> : Lineare Operatoren in Hilberträumen	109
<i>S. V. Vonsovsky, Yu. A. Izyumov, E. Z. Kurmajev</i> : Superconductivity in Transition Metals	109
<i>V. L. Aksienov, N. M. Plakida</i> (ed.), <i>S. Stamenkovič</i> : Rasszejanie nejtronov szegnetoelektrikami ..	110
<i>Salikhov, K. M., Molin, Yu. N.</i> (editor), <i>Sagdeev, R. Z. és Buchacsenko, A. L.</i> : Spinpolarizáció és mágneses hatások gyökreakciókban	110
<i>H. Ryssel and H. Glawischnig</i> (eds): Ionimplantation: Equipment and Techniques	111
<i>C. A. J. Fletcher</i> : Computational Galerkin Methods	112
<i>Olivier Pironneau</i> : Optimal Shape Design for Elliptic Systems	112
<i>Richard J. Goldstein</i> (ed.): Fluid Mechanics Measurements	113
<i>Tuncer Cebeci, Peter Bradshaw</i> : Physical and Computational Aspects of Convective Heat Transfer ..	114
<i>J. K. Plattens, J. C. Legros</i> : Convection in Liquids	114
<i>Tuncer Cebeci</i> (ed.): Numerical and Physical Aspects of Aerodynamics Flows	115
<i>Tuncer Cebeci</i> (ed.): Numerical and Physical Aspects of Aerodynamic Flows II	116
<i>J. A. Essers</i> (ed.): Computational Methods for Turbulent, Transonic and Viscous Flows	116
<i>Giovanni Gallavotti</i> : The Elements of Mechanics	117
<i>J. Christiansen</i> (ed.): Hiperfine Interactions of Radioactive Nuclei	117
<i>H. Beck, H. J. Güntherodt</i> (szerk.): Glassy Metals II	118
<i>Reiner Behrisch</i> : Sputtering by Particle Bombardement II	120
<i>H. P. Weber, W. Lüthy</i> (eds): Laser Spectroscopy VI	120
<i>Y. Ohnuki and S. Kamefuchi</i> : Quantum Field Theory and Parastatistics	120
<i>A. Bianconi, L. Tuccocchia and S. Stippich</i> (eds): EXAFS and Near Edge Structure Spectroscopy ..	120
<i>V. E. Zuev and I. E. Naats</i> : Inverse Problems of Lidar Sensing of the Atmosphere	122
<i>M. Kubicek, M. Marek</i> : Computational Methods in Bifurcation Theory and Dissipative Structures	123
<i>F. J. Yndurián</i> : Quantum Chromodynamics	123
<i>M. Ausloos and R. J. Elliott</i> (eds): Magnetic Phase Transitions	124
<i>V. N. Popov</i> : Functional Integrals in Quantum Field Theory and Statistical Physics	125

307.226

IV. 9

8

MAGYAR

FIZIKAI FOLYÓIRAT

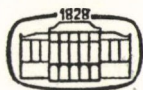
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXXIII. KÖTET

2. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1985

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendőek:

Turchányi György egyetemi tanár
Bifizikai Intézet
1444 Budapest VII., Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 120 Ft, Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest, V., Alkotmány utca 21, (pénzforgalmi jelzőszámunk 215—11 488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külforgalmazási Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218—10 990 útján eszközölhetők).

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

ÁRAMLÓ AEROSZOLOK LECSAPÓDÁSÁNAK MODELL VIZSGÁLATA*

BALÁSHÁZY IMRE

Központi Fizikai Kutató Intézet

TARTALOMJEGYZÉK

Bevezetés	128
1. Elméleti áttekintés	128
1.1. Az emberi légzőszerv szerkezete	128
1.2. Aeroszolk lecsapódása a légzőrendszerben	131
1.3. Az aeroszolk viselkedése nyugvó és áramló levegőben	138
1.3.1. A közegellenállási erő	138
1.3.2. A gravitációs erő	139
1.3.3. Tehetetlenségi erő, impakció	141
1.3.4. A Brown mozgásból származó erő	143
1.3.5. Egyéb erők	144
1.4. Részecskeméret és részecskeméret-eloszlás	145
1.4.1. Lineáris részecskeméret definíciók	145
1.4.2. Alak faktorok	146
1.4.3. Részecskeméret eloszlások	148
2. Célkitűzések	150
3. Az elvégzett számítások	150
3.1. Gravitációs ülepedés csövekben	150
3.1.1. Részecskék gravitációs ülepedése vízszintes csőben	150
3.1.2. Egyéb számítások részecskék gravitációs ülepedésére vízszintes csőben	156
3.1.3. Részecskék gravitációs ülepedése a vízszintessel α -szöget bezáró csőben	159
3.2. Impakcióból származó depozíció számítása görbült csövekben	160
3.3. A Brown diffúzióból származó depozíció számítása csövekben	163
4. Az elvégzett kísérletek	165
5. Eredmények	173
6. Összefoglalás	176
7. Irodalom	177
8. Köszönetnyilvánítás	177
9. Függelék	178

* Érkezett 1983. jan. 20. Egyetemi doktori dolgozat.

BEVEZETÉS

Az ipar, a tudományos kutatás és az egészségvédelem területén jelentős kérdés az áramló aeroszolok lecsapódásának, a porok kiülepedésének vizsgálata. Számos helyen az átlagosnál nagyobb mennyiségű por vagy egyéb szennyező anyag belélegzésével kell számolnunk. Ezek egészségkárosító hatása közismert. A Paksi Atomerőmű megépülésével méginkább előtérbe került a levegőből az emberi szervezetbe jutott radioaktív anyagok károsító hatásának, a légzőrendszerben történő porlerakódásnak a vizsgálata. Ehhez meg kell tudni határozni, hogy a légzőtraktus egyes szakaszaiban mekkora a kiülepedés mértéke a belélegzett aeroszol különböző paramétereinek függvényében.

Dolgozatom első részében bemutatom az emberi légzőszerv szerkezetét, különös tekintettel mint áramlási rendszernek a paramétereit, valamint a légzőapparátusban történő aeroszol lecsapódási folyamatok eddigi — az irodalomban talált — számításainak és mérésének eredményeit.

A következő részben az aeroszolok dinamikai kölcsönhatásainak főbb típusait ismertetem. Ezek után térek rá a kitzúzott konkrét feladatra: a légzőrendszerben lejátszódó depozíciós alapfolyamatok egyszerű modell számítására és kísérleti úton történő ellenőrzésére, egyenes és görbült keresztmetszetű csövekben. Ahol a rendszer paraméterei: a részecske átmérő, a csőátmérő, a csőhossz, valamint az áramlási sebesség, és ha a cső ferde vagy görbült, a lehajlás szöge vagy a cső görbülete.

Az utolsó részben a kapott eredményekről számolok be.

A függelék pedig a készített számítógépes programokat tartalmazza.

1. ELMÉLETI ÁTTEKINTÉS

1.1. Az emberi légzőszerv szerkezete

A légzőszerv elsődrendű feladata a gázcsere biztosítása, azaz oxigén felvétele és szén-dioxid leadása. Ez valamennyi élő szövet uralkodó anyagcsere igénye, melynek megfelelően a keringő vérnek gyakorlatilag száz százaléka minden körforgásban átjárja a tüdőt. A légzőfelület nagy részén csupán $0,5\ \mu\text{m}$ -es fal választja el a levegőt a kisvérkör hajszálereiben keringő vértől. Ezen elválasztó rétegből mintegy $0,2\text{—}0,2\ \mu\text{m}$ jut a tüdőhólyagocskák hámfára és a tüdőhajszálerek endotheljére. A fennmaradó $0,1\ \mu\text{m}$ pedig a közbülső alaphártyákra és a kötőszöveti vázra. A légzőszerv egyéb igen bonyolult szervei biztosítják a levegő oda, s elvezető útjait. Ide vannak beépítve azon biztonsági alkatrészek, amelyek arról gondoskodnak, hogy lehetőleg csak megfelelő minőségű levegő kerüljön be a légutakba, míg megfelelő reflexek és egyéb mechanizmusok a légutak öntisztulását szolgálják.

A levegőben levő aeroszolok kiülepedését tekintve a légutakat három részre szokás osztani:

1. orr-garat (nasopharyngealis rész: N-P)
2. légcső-bronchusfa (tracheo-bronchialis rész: T-B)
3. tüdő (pulmonaris rész: P)

1. Nasopharyngealis rész

Ide tartozik az orrüreg, a szájüreg és a garat.

Az orrüreg funkciója a beszívott levegő durva lebegő anyagoktól (rovarok, növényi szálak, por) való megtisztítása, előmelegítése és páradúsítása.

Az orrüreg (csontos porcos) falait nyálkahártya borítja. Elülső részében (a vestibulumban) erős sörteszerű szőrök találhatók, amelyek az orrnyíláson belül szita-

szerű szűrőt alkotnak, majd hátrafelé haladva a felszín fokozatosan átmegy csillószőrös hengerhámra.

Belégzéskor az aránylag szűk, nagy felületű, több járatra oszló üregeken áthaladó levegőben lebegő por nagy része hozzátapad a nedves falakhoz, egyben kellő mennyiségű párat vesz fel, és a levegő kellő hőmérsékletűre felmelegszik. A vékony nyákfilmet a csillók mozgása állandó áramlásban tartja a garat, majd annak felső részéből a szájüregi rész felé. Így a lerakódott por normális körülmények között folyamatosan a garatba kerül, ahonnan nyeléskor akaratlanul továbbjut a gyomorba.

Szájon át történő belégzés esetén a légjárat rövidebb, szélesebb és sokkal egyenesebb a garatig. Így ekkor a levegő megtisztulása gyakorlatilag a garatban kezdődik. A garat alsó részéből előre és lefelé nyílnak az alsó légutak a gégevel.

2. *Tracheo-bronchialis rész*

A beszívott levegő útja a garaton át a gégen keresztül vezet a légcsőbe.

A légcső (trachea) 12—14 cm hosszúságú, 1,7 cm körüli átmérőjű elől és oldalt hengeres, hátul belapult, porcos és részben hártvás izmos falú, nyálkahártyával bélelt cső. Falát C alakú üveporcos gyűrűrészek képezik elől és oldalt, hátsó fala hártvás; kötőszövetből és sima izomból áll. A porcgyűrűket gyűrű alakú hártvás részek kötik össze.

Nyálkahártyáját többmagsoros, csillószőrös hengerhám képezi, a csillók effektív csapása a garat felé irányul.

Idősebb korra a légcső méretei akár duplájára is nőhetnek (nőknél inkább szélesedik, férfiaknál inkább hosszabbodik és kardhüvely alakú lesz).

A légcső elágazódása: légcső két főhörgőre oszlik, amelyek a tracheával azonos felépítésűek. A jobb valamivel tágabb mint a bal, a függőleges középsikkal: a jobb 25°-os, a bal 45°-os szöget zár be, elágazódása hamarabb kezdődik, valamivel hátrább fekszik mint a bal és egyetlen gyenge görbülete van, míg a bal gyengén S alakban kanyarog. Mindezekből következik, hogy idegen testek sokkal nagyobb valószínűséggel jutnak be a jobb tüdőbe.

A főhörgők és azon túl minden további ág dichotomikusan ágazik el, azaz nem egy irányát megtartó főág ad jóval kisebb mellékágakat, hanem általában minden elágazódás közel egyenértékű ágakat eredményez. A jobb főhörgő kb. 2 cm, a bal pedig csak kb. 5 cm után ágazik el, majd ezek az ágak a bronchus segmentalisokra. (Melyeknek száma megegyezik a tüdő-szegmentumok számával; ez a tüdő lényeges felépítési egysége. A jobb tüdőben: a felső lebenyben 3, a középsőben 2, és az alsó lebenyben 5 szegmentum van. A bal tüdőben középső lebeny nem lévén, az ezt magába foglaló felső lebeny bír több bronchus segmentalissal.) A szegmentumokon belül a segmentalis bronchusok bronchusokra, majd bronchiolusokra (ennek falán már nincsen porc, az irodalomban azonban az elnevezés nem egységes) oszlanak, amelyek eleinte még a tracheához és a főhörgőkhöz hasonló szerkezetűek, csupán a falukban levő üveporcok már nem gyűrűk, hanem szabálytalan, néha elágazó porcos szigetek. A fal alkotásában fokozatosan simaizomszövet és rugalmas kötőszövet válik uralkodóvá. A bronchiolusokban a porc teljesen megszűnik, ugyanis itt már nincs szükség falmerevítésre, mert olymódon épülnek be a tüdőszövet szivacs-

szerű rugalmas szövetekébe, hogy belégzéskor az egész tüdővel együtt tágulnak, és nincs lehetőség arra, hogy a külsőnél alacsonyabb nyomás egyiket vagy másikat összeesésre bírja. A hám a kisebb hörgők felé egyszerű csillószőrös hengerhámmá, majd részben csilló nélküli köbhámmá laposodik el.

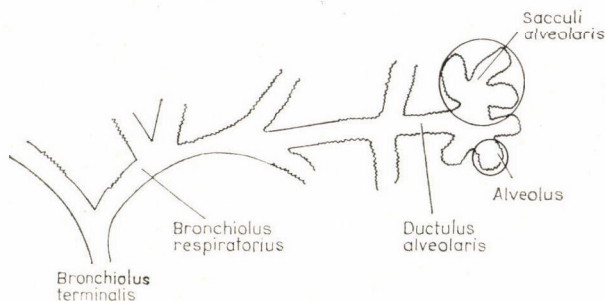
3. *Pulmonaris rész*

A bronchus-bronchioles kategóriák határához kapcsolódnak a kötőszövettel különválasztott nagyobb tüdőszöveti egységek, a lobulusok. A loboluson belül a bronchus terminalis még tovább oszlik bronchiolusokra. Az utolsó bronchiolus neve: bronchiolus respiratorius. Ezt már nem borítja csillós köbhám és falából már helyenként valódi légzőfelületet képviselő egyes alveolusok nyílnak. Egy-egy bronchiolus respiratorius végén két, vagy több ductulus alveolaris nyílik, amely egyszerűen egy táguló folyosó és ebből fülkeszerűen nyílnak a tüdőhólyagocskák, az alveoli pulmonisok. A ductulus alveolarisok végső részeiből sok helyen lóherelevélszerű csoportokban nyílnak hármás vagy többes alveolus-csoportok; ezeket sacculi alveolarisoknak nevezik.

Az alveolusok falában előfordulnak olyan sejtek, melyek erősen phagocytálóak (falósejt működést mutatóak). A sejtek mozgékonyak, behatolva az alveolusok üregébe, ott a belélegzett igen finom porszemcséket phagocytálják, s végül vagy a bronchus-rendszer ciliaris nyálkaáramlásával bekerülnek a garatba; vagy bevándorolnak a tüdőlebenyekék kötőszöveti sövényeibe, ahol lerakódnak; vagy a nyirok-árammal a tüdő regionális nyirokcsomóiba jutnak, ahol letelepsznek; vagy részben el is pusztulnak és a magukkal vitt részecskék sejten kívül raktározódnak. A tüdőben így kialakuló porlerakódásokat pneumoconiosisoknak nevezik. Pl. szén (korom) lerakódása aránylag ártalmatlan (anthracosis), v. pl. a dohányzás ártalmasságát is inkább a belélegzett kátrányanyagok (rákkeltők) okozzák. Egyes ipari porok, szénpor, vaspár lerakódása sem túlságosan veszélyes, hacsak nem extrém fokúak. A legveszélyesebb, és komoly iparegészségügyi problémát vet fel a kvarcot tartalmazó kőporok belégzése. Ezek a kötőszöveti elemeket burjánzásra serkentik (silicosis), és a tüdő légzőfelületét fokozatosan elpusztítják.

Az alveolaris epithelium felszínén felületaktív folyadékfilm van (100–200 Å vastagságban), hogy a felületi feszültség össze ne roppantsa az alveolusokat.

Az emberi légzőszerv főbb adatainak táblázatba foglalása előtt felvázoljuk egy tüdő-lobulus szerkezetét:



A légjáratokra, ill. a levegő áramlására vonatkozó adatok [1]:

	N (db)	d (cm)	L (cm)	S (cm ²)	u (cm · sec ⁻¹)	t (sec)
Trachea	1	1,7	12	2,3	150	0,07
Fő bronchus	2	0,8	5; 2	1,0	180	0,04
1. rendű br.	12	0,4	3	1,5	130	0,02
2. rendű br.	100	0,2	1,5	3,1	65	0,02
3. rendű br.	770	0,15	0,5	14	14	0,04
Terminalis br.	$5 \cdot 10^4$	0,06	0,3	150	1,3	0,22
Respiratorius br.	10^5	0,05	0,15	220	0,9	0,17
Duct. alv.	10^7	0,02	0,02	8200	0,025	0,82
Alveolus	10^8	0,03		40 m ²	0	1,2

ahol: N : darabszám; d : a légjáratok belső átmérője; L : azok hossza; S : azok keresztmetszete; u : a levegő átlagos áramlási sebessége; t : az egyes szakaszokban egy elemi levegőrész tartózkodási ideje.

(Természetesen az egyes egyéneknek ezen értékektől jelentős eltérések lehetnek, pl. az alveolusok összkétszámára 15 m²—100 m²-ig lehet adatokat találni az irodalomban.)

További adatok:

1 csilló kb. 10 μm hosszú és egy csapással kb. 16 μm-rel tolja előre a nyákréteget, átlagos frekvenciája: $\bar{v} = 20 \text{ sec}^{-1}$, így a nyákréteg 1,9 cm · min⁻¹ sebességgel halad a garat felé

nyugodt légzésnél [3]: $\bar{v} = 16 \text{ min}^{-1}$,
 $\Delta p = \begin{cases} + (800 - 1100) \text{ Pa} & \text{kilégzésnél} \\ - (300 - 500) \text{ Pa} & \text{belégzésnél} \end{cases}$
 perctérfogat = 7—9 l

erős légzésnél [3]: $\bar{v} = 70 - 90 \text{ min}^{-1}$
 $\Delta p = \begin{cases} + (8000 - 13000) \text{ Pa} & \text{kilégzésnél} \\ - (5000 - 10000) \text{ Pa} & \text{belégzésnél} \end{cases}$

1.2. Aeroszolok lecsapódása a légzőrendszerben

Az emberi légzőszervbe a radioaktív aeroszolok a radioaktív gázok és gőzökhöz hasonló módon kerülnek, azonban visszatartásukat az aeroszol jellemzők szabják meg.

Az aprítással, kondenzációval vagy az égéssel keletkező aeroszolok, így a radioaktív aeroszolok is, általában log-normál részecske méret eloszlást követnek. Monodiszperz aeroszolok előállítására, többnyire az aeroszol kutatás céljára, csak különleges feltételek között lehetséges [25].

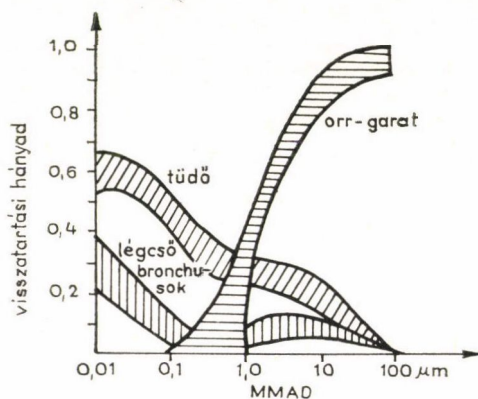
A log-normál eloszlást a medián átmérővel, aminél nagyobb átmérőjű a részecskék fele, valamint a standard geometriai deviációval (σ_g), ami a Gauss eloszlású függvény szórása, lehet jellemezni. A részecske méret eloszlási függvény, így a medián is, vonatkoztatható a részecskék számára (Count Median Diameter = CMD), vagy a tömegére (Mass Median Diameter = MMD). A radioaktív aeroszoloknál az

aktivitásra vonatkozó medián a mérvadó (Activity Median Diameter = AMD). Az aeroszokok légzőszervbe való visszatartását az aerodinamikai tulajdonságaik határozzák meg, ami a részecskék alakjától és sűrűségétől is jelentős mértékben függ. Ezen paraméterek hatását az aerodinamikailag egyenértékű átmérő fogalmának bevezetésével lehet figyelembe venni. Az aerodinamikai átmérőn a vizsgált részecskével azonos határsebességgel ülepedő egységnyi sűrűségű, gömbalakú részecske átmérőjét értjük. Az aerodinamikai egyenértékben kifejezett, a fentiekben leírt mediánokat:

- ha részecskeszám eloszlásra vonatkoznak CMAD (Count Median Aerodynamic Diameter)-nek,
 - ha tömeg szerinti eloszlást jellemeznek MMAD (Mass Median Aerodynamic Diameter)-nek, és
 - ha a radioaktivitás eloszlását írják le AMD (Activity Median Aerodynamic Diameter)-nek
- nevezzük és mikrométer (μm) egységben adjuk meg.

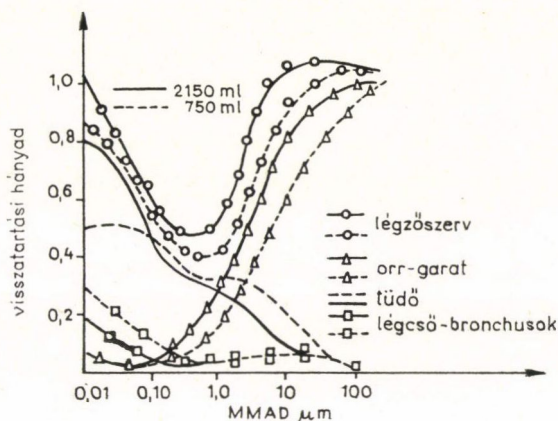
A belélegzett aeroszol részecskék $>1 \mu\text{m}$ átmérőnél jórészt a tehetetlenségi erők hatására (impakció) az orr-garat rendszerben csapódnak le. A $0,1 \mu\text{m}$ -nél nagyobb részecskék a légzőrendszerben gravitációs úton is kiülepedhetnek, míg a $<0,1 \mu\text{m}$ átmérőjű részecskék döntő többsége Brown-mozgás révén csapódik a légzőszerv falához. A lecsapódás hányadát az egyes traktusokban 1450 ml légzési térfogatra az MMAD függvényében $\sigma_g = 1,2-4,5$ -nél az 1.2.1. ábra szemlélteti. A lerakódási hányad MMAD függését két különböző légzési térfogatra, mely közelítőleg 11 és $321 \cdot \text{min}^{-1}$ perctérfogatnak felel meg, az 1.2.2. ábra mutatja. Az ábrán látható a teljes légzőtraktus visszatartási hányadának MMAD függése is.

Az ICRP* durva közelítésként [6] az aeroszokok és a légzőszerv kölcsönhatására az aeroszol jellemzők figyelmen kívül hagyásával az 1.2.1. táblázatban megadott



1.2.1. ábra. Az egyes légzőtraktusok aeroszol részecske visszatartó képessége az MMAD függvényében $\sigma_g = 1,2-4,5$ tartományban, 1450 ml légzési térfogatnál

* International Commission on Radiological Protection.



1.2.2. ábra. A légzőszerv és az egyes légzőtraktusok aeroszol visszatartó képessége az MMAD függvényében 750 és 2150 ml légzési térfogatnál, ami közelítőleg $111 \cdot \text{min}^{-1}$, illetve $321 \cdot \text{min}^{-1}$ perctérfogatnak felel meg

1.2.1. TÁBLÁZAT

A belélegzett aeroszol visszatartás közelítő standard eloszlása és a standard ember levegő fogyasztása az ICRP szerint [6]

A belélegzett aeroszol %-os megoszlása	
Kilégzett rész	25
A felső légutakban lerakódott hányad	50
A tüdőben visszatartott rész	25*

* fele a felső légutakban lerakódott résszel együtt az első napon kiürül, míg a maradék 12,5% „oldhatatlan” részecskék esetében 120 napos felezési idővel, „oldható” esetben rövid idő alatt kiürül.

A belélegzett levegő mennyisége:	
napi 8 óra munkaidő alatt:	10^7 cm^3 és
napi 16 óra munka nélkül eltöltött idő alatt:	10^7 cm^3
összesen:	$2 \cdot 10^7 \text{ cm}^3 \cdot \text{nap}^{-1}$

értékeket fogadta el a megengedhető maximális terhelés és a megengedhető dózisok számítására. A táblázatban feltüntetettük a napi levegőfogyasztás standard értékét is [24].

Az aeroszolok légzőszervi depozíciójának tanulmányozására több kísérleti módszert is kidolgoztak.

Állatkísérleteknél igen elterjedt módszer, hogy a radioaktív vagy fluoreszcens aeroszolt belélegzett kísérleti alany tüdejéből mikroszkopikus mintákat vesznek,

s a minta aktivitásából, ill. a fluoreszkálás intenzitásából az adott helyen kiülepedett por mennyisége meghatározható.

Humán kísérletekben a tüdő külső régióiban kiülepedett aeroszol mennyiségét becsülni lehet egy, a test felületére helyezett Geiger—Müller számláló segítségével.

A kiülepedett por mennyisége a be- és kilélegzett levegő porkoncentrációjának mérésével is meghatározható. Az aeroszol belélegzése után az első kilégzéskor a felsőbb légutakból, majd további kilégzésekkor egyre inkább a mélyebb régiókból származik a kilélegzett por [10].

A kísérleti eredmények erősen eltérhetnek egymástól, s ez főképpen durva aeroszokok esetében és orrlégzésnél áll fenn, melynek oka, hogy az orrüreg alakja nagyon különböző lehet, (s a durva aeroszokok főképp ott ülepednek ki).

Az orrüregben történő kicsapódás tanulmányozására két módszert használnak:

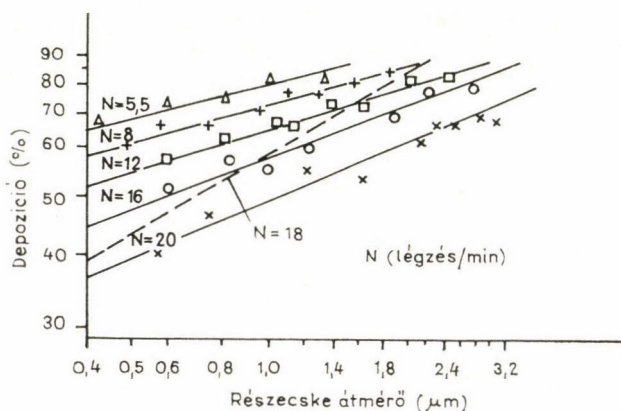
a) Egy személy belélegez valamely aeroszolt az orrán át és azt azonnal kilégzi a száján keresztül. (Jó közelítéssel feltételezhető, hogy kicsapódás csak az orrüregben történik.)

b) Állatkísérletekben a csukott szájú állat légcsővére egy szivattyút kötnek, amely átszívja az aeroszolt az állat orrán [12].

Orrlélegzésnél, ha a légzési térfogat növekedik, akkor a kicsapódás mértéke erősen megnő (1.2.2. táblázat), ami arra mutat, hogy a kicsapódást főképp az impakció okozza [11].

1.2.2. TÁBLÁZAT

Részecske átmérő (μm)	A kicsapódás mértéke %-ban	
	$20 \text{ l} \cdot \text{min}^{-1}$	$29 \text{ l} \cdot \text{min}^{-1}$
12	87	99*
7,4	42	71
2,2	14	25
1,8	6	19



1.2.3. ábra. Aeroszokok depozíciója a légzőrendszerben; szájon át (folytonos vonal) és orron át (szaggatott vonal)

Az aeroszolok kicsapódásának mértéke (Θ) a légzőrendszerben csökken, ha a légzés frekvenciája (N (légzésszám \cdot min⁻¹)) nő (1.2.3. ábra) [9].

Az 1.2.2. táblázatból és az 1.2.3. ábrából is látható, hogy az egész légzőrendszerre vonatkoztatva a kicsapódás mértéke nő a részecskemérettel. Az 1.2.3. ábrán a folytonos vonal orrlégzésre, míg a szaggatott vonal szájon át történő légzésre vonatkozik. Látható, hogy az előző meredekebben emelkedik a részecskemérettel.

A kiülepedés mértékének csökkenése a légzésszám növekedésével mutatja, hogy $D > 0,4 \mu\text{m}$ esetén a gravitációs ülepedés játssza a fő szerepet. A kiülepedés főképp a be- és kilégzés közt levő szünetben következik be. (Ha ezen szünetet a légzés visszatartásával növeljük, akkor a kiülepedés mértéke is erőteljesen nő) [14]. Be- és kilégzés-kor a kiülepedési folyamatok nagyjából azonosak, a felső légutakban történő impakciót kivéve, ami belégzés-kor sokkal erőteljesebb.

Az 1.2.3. táblázat az orr-garat kiülepedésére ($\Theta\%$) mutat kísérleti eredményeket (melyeket üregi nyulakon nyertek) [15].

1.2.3. TÁBLÁZAT

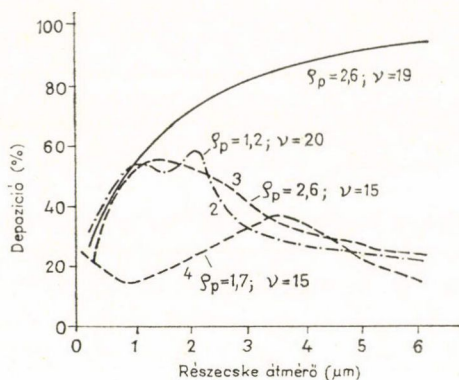
Részecske átmérő (μm)	$\Theta\%$
1	29
4	68
8	98

1.2.4. TÁBLÁZAT

Részecske átmérő (μm)	$\Theta\%$		
	A	B	C
0,4 — 1,24	26	32	42
1,24 — 2,10	33	33	34
2,10 — 2,92	35	37	28
2,92 — 3,76	48	37	15
3,76 — 4,56	46	40	14
4,56 — 5,42	53	37	10
5,42 — 6,26	62	34	4
6,26 — 7,10	67	33	0
> 7,10	90	10	0

Az 1.2.4. táblázat a bronchusokig lejutott olajköd lokális kiülepedésének mértékét ($\Theta\%$) mutatja a bronchusokban (A), a bronchiolusokban (B) és az alveolusokban (C), egereken végzett kísérletek alapján [16].

Az egészségre legkárosabb alveoláris kiülepedés mértéke a részecskeméret azon tartományában, ahol még nem a Brown diffúzió a meghatározó, maximumot kell hogy mutasson, ugyanis a részecskeméret növekedésével ugyan nő annak a valószínűsége, hogy egy adott részecske kiülepedjen, azonban csökken az alveolusokig lejutó részecskék száma. Az 1.2.4. ábra különböző szerzők idevonatkozó számításait



1.2.4. ábra

mutatja (Az ábra a részecske átmérőjének (μm -ben) függvényében mutatja a kiülepedés mértékét (%); ρ_p a részecskék sűrűsége ($\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ -ben), ν pedig a légzés frekvenciája (min^{-1} -ben)).

Az 1-es görbe az egész légzőrendszerre vonatkozó kiülepedést, a 2-es, 3-as és 4-es görbe pedig az alveoláris kiülepedést mutatja [17], [9], [18], [10].

Kis részecskeméreteknél az 1-es, 2-es és 3-as görbék szinte együtt futnak, ami mutatja, hogy ebben az esetben az alveoláris kiülepedés az egyedül mérvadó. A 4-es görbe szembevető különbözősége valószínűleg a részecskeméret meghatározás szisztematikus hibájának következménye [19]. A szervezetre a legnagyobb veszélyt tehát az $\sim 1 \mu\text{m}$ átmérőjű részecskék okozzák (ugyanis ezen részecsketartományban van az alveoláris kiülepedés maximuma).

Lifshits, Lykhina és Erenburg kísérletei szerint [20] a légzőrendszerben a kiülepedés mértéke nagyobb, ha a részecskék elektromosan töltöttek. Pl $\sim 2 \mu\text{m}$ átmérőjű, semleges Al por inhalációjakor 34%-os kiülepedést mértek, míg feltöltött esetben 66%-osat.

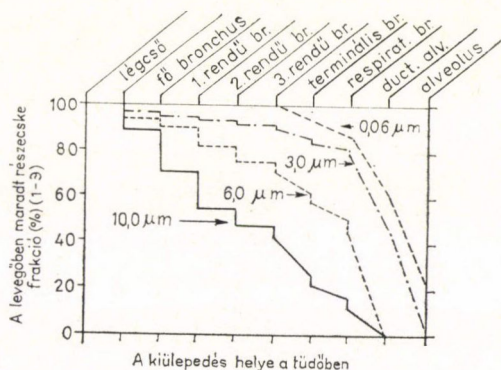
Érdekes elméleti munka kapcsolódik Findeisen nevéhez [21], ki egy nagyon leegyszerűsített tüdőmodellen számolta a kiülepedés mértékét a légzőrendszer minden részében. Feltételezte, hogy a légutak azonos rendű szakaszai egyforma hosszú, egyforma átmérőjű, körkeresztmetszetű egyenes csövek, ezenkívül, hogy valamennyi elágazás szöge azonos, továbbá, hogy az alveolusok gömbüregek és, hogy az áramló részecskék oldhatatlanok és nem higroszkóposak a tüdő atmoszférájában. Feltételezte, hogy a ki- és belégzés ugyanolyan ütemben történik ($200 \text{ cm}^3/\text{sec}$), és a köztük levő szünet 2 sec. Figyelembe vette, hogy a kiülepedést a légutakban a gravitációs ülepedés és a diffúzió, az elágazásokban pedig az impakció határozza meg.

Az így kapott értékek azonban — a kísérleti eredményekkel összevetve — túl nagyoknak bizonyultak.

(Később Findeisen számításait Landahl [22] némiképp finomította.)

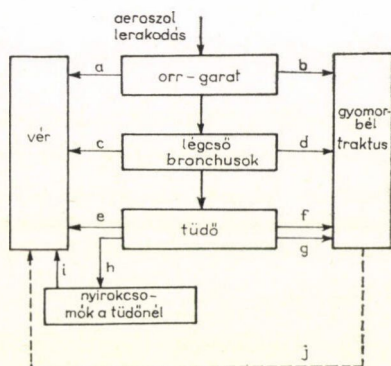
Findeisen számításai alapján készült az 1.2.5. ábra, amely a légzőrendszer egyes szakaszaira megadja néhány részecskeméretre a levegőben maradt porfrakciót (azaz a ki nem ülepedés mértékét).

Radioaktív izotópok „tisztulása” a légzőrendszerből:



1.2.5. ábra

1.2.5. TÁBLÁZAT



Az ICRP légzőszerv tisztulási modellje

Szerv	Tisztulási út az ábrán	$t_{1/2}$	D osztály tisztulási hányada	$t_{1/2}$	W osztály tisztulási hányada	$t_{1/2}$	Y osztály tisztulási hányada
Orr-garat	a	4 perc	0,50	4 perc	0,10	4 perc	0,01
	b	4 perc	0,50	4 perc	0,90	4 perc	0,99
Légcső, Bronchusok, Tüdő	c	10 perc	0,50	10 perc	0,10	10 perc	0,01
	d	10 perc	0,50	10 perc	0,90	10 perc	0,99
	e	30 perc	0,80	90 nap	0,15	360 nap	0,05
	f	—	—	1 nap	0,40	1 nap	0,40
	g	—	—	90 nap	0,40	360 nap	0,40
	h	30 perc	0,20	90 nap	0,05	360 nap	0,15
Nyirokcsomók a tüdőnél	i	30 perc	1,00	90 nap	1,00	360 nap	1,00

A táblázat az ICRP légzőszerv tisztulási modelljét, valamint az egyes komponensekhez tartozó felezési időket és a tisztulási hányadokat tartalmazza.

(Megjegyzés: a j-vel jelölt tisztulási út a gyomor-bél rendszerben lejátszódó felszívódást reprezentálja.)

A felső légutakban, az orr-garat és a légső bronchus részben lecsapódó aeroszol részecskék teljes mennyisége; az alsó légutakban, a tüdőben lerakódottak egy része a csillószőrös mozgás révén a garaton át egy napon belül a gyomor-bél rendszerbe kerül. A légzőrendszerbe lerakódott radioaktív anyagok tisztulására az ICRP (International Commission on Radiological Protection) 1959-ben [6] ajánlást tett közzé, 1. 1.2.1. táblázat. Az ICRP 1965-ben finomította a légzőszerv tisztulására vonatkozó ajánlását [7]. A radiotoxikológiai ismeretek alapján a tüdő tisztulására új modellt ajánlott, melyet az 1.2.5. táblázat mutat, ebben megadjuk a tüdőtisztulási modell egyes tagjainak részarányát, valamint a sugárvédelmi számításokhoz javasolt biológiai felezési időket.

Az „oldódó” és az „oldhatatlan” vegyületcsoport használatát elvetették, helyette a szervetlen vegyületeket három osztályba (D , W , Y) sorolták. A D osztályba tartozó vegyületek kiürülése $<1-10$ nap, a W osztályé $10-100$ nap, míg az Y osztályé >100 nap felezési idővel játszódik le.

Természetesen az ICRP ezen tüdőmodellje is csupán durva közelítés, melyet csak a megengedhető sugárterhelés meghatározásánál és a konkrét eseteknél várható tisztulás előzetes becslésére lehet felhasználni.

A kiürülési folyamat jelentős egyedi szórást mutat, így az egészségi állapot is nagymértékben befolyásolhatja a légzőszerv tisztulását.

1.3. Az aeroszokok viselkedése nyugvó és áramló levegőben

Sebességeloszlás kör keresztmetszetű csőben lamináris áramlás esetén:

$$v = 2u \left(1 - \frac{l^2}{r^2} \right),$$

ahol v a keresztmetszet valamely pontjában az áramlás sebessége; u az átlagsebessége; l az illető pont távolsága a cső keresztmetszetének középpontjától, és r a cső sugara [26].

Az aeroszokok jellemzése tulajdonképpen az álló és áramló levegőben levő részecskék mozgásának leírásából áll. Az aeroszokok tulajdonságait a részecskékre ható erők vizsgálatával szokás tárgyalni.

1.3.1. A közegellenállási erő

Ha a részecske és az azt körülvevő közeg közt mozgás van, akkor közöttük közegellenállás alakul ki. A részecskére ható ún. közegellenállási erő:

$$F_R = \frac{CA_p \varrho u^2}{2}$$

ahol: C a közegellenállási tényező (dimenzió nélküli), A_p a részecske felületének a mozgás irányába eső vetülete, ϱ a fluidum sűrűsége; és u a részecske és a közeg közti relatív sebesség.

Ha az áramlás lamináris, a fluidum viszkozitása (η) nagy, és az R sugarú részecske relatív sebessége (u) kicsi, akkor a közegellenállási erőt a Stokes törvény fejezi ki:

$$F_R = 6\pi\eta uR.$$

1.3.2. A gravitációs erő

Ha a részecskére gravitációs erő (F_G) hat, addig gyorsul, míg F_R egyenlő nem lesz F_G -vel, majd a részecske az ún. határsebességgel (v_s) ülepszik tovább, melynek értéke gömb alakú részecskére:

mivel: $F_R = F_G$,

$$\frac{CA_p \varrho v_s^2}{2} = mg - V_p \varrho g,$$

ahol m a részecske tömege és V_p a térfogata ($V_p = \frac{m}{\varrho_p}$), ebből:

$$v_s = \sqrt{\frac{2gm(\varrho_p - \varrho)}{\varrho_p \varrho A_p C}},$$

gömbre:

$$\frac{m}{\varrho_p A_p} = \frac{V_p}{A_p} = \frac{4}{3} \frac{R^3 \pi}{R^2 \pi} = \frac{4}{3} R,$$

így

$$v_s = \sqrt{\frac{4gD(\varrho_p - \varrho)}{3\varrho C}},$$

ahol D a részecske átmérője. Tapasztalati tény: ha $Re < 0,3$, akkor $C = \frac{24}{Re}$ (Re az ún. Reynolds-szám). Így:

$$v_s = \frac{gD^2(\varrho_p - \varrho)}{18\eta}.$$

Mivel a Stokes törvény is $Re < 0,3$ -nál érvényes, ugyanezen eredményt kell kapnunk a:

$$3\pi\eta v_s D = mg - V_p \varrho g$$

egyenletből is, amely az egyenlet átrendezésével valóban megkapható.

$Re > 1000$ esetén $C = 0,44$ ebből:

$$v_s = 1,74 \sqrt{\frac{gD(\varrho_p - \varrho)}{\varrho}}$$

és $0,3 < Re < 1000$ esetén $C = \frac{18,5}{Re^{0,6}}$, melyből v_s szintén kifejezhető [2].

Ha nem gömb alakú a részecske, akkor a közegellenállási erő a részecske alakjától és a mozgáshoz viszonyított orientációjától függ. (A Stokes törvény érvényességi tartományában ($Re < 0,3$) a részecske megtartja kezdeti orientációját.)

Ha a részecskekoncentráció elég nagy, akkor a részecskék zavarják egymást. Ez az ún. késleltetett esés. Általában, ha a koncentráció kisebb 0,1 térfogatszázaléknál, akkor ezen hatás elhanyagolható.

Ha a részecskeátmérő összemérhető a cső átmérőjével, akkor a cső falai további késleltetést okoznak. Ez a falhatás. Szilárd részecskékre $v'_s = k_{fal} \cdot v_s$ ha $Re < 0,3$:

$\beta = \frac{\text{részecskeátmérő}}{\text{csőátmérő}}$	k_{fal}
0	1
0,1	0,8
0,5	0,17
0,8	0,02

ha $\text{Re} > 1000$: $k_{\text{fal}} = 1 - \beta^{1,5}$.

Ha szilárd részecskék ülepsznek gázokban, akkor a Stokes törvény alkalmazhatóságának a kis részecskeátmérők tartományában határa van. Ha a részecskék mérete összemérhető a közeg molekuláinak közepes szabad úthosszával, akkor az esési sebesség a Stokes törvényből számítottnál nagyobb lesz. A korrekció, az ún. *Cunningham-féle korrekció*, melyet a Cunningham-féle faktorral vagy csúszási faktorral (slip factor) fejeznek ki:

$$K_m = 1 + \left(\frac{2}{pD} \right) 6,32 + 2,01 \exp(-0,1095 pD),$$

ahol K_m a slip faktor, p a gáz nyomása Hgcm-ben és D a részecske átmérője μm -ben [23]. Az összefüggés 20°C -ra érvényes.

Néhány értékre K_m :

Részecskeátmérő (μm)	K_m
0,1	2,880
0,5	1,325
1,0	1,160
5,0	1,032
10,0	1,016

A K_m -mel korrigált ülepedési határsebesség:

$$v_s = \frac{gD^2(\varrho_p - \varrho)}{18\eta} K_m.$$

Részecske mozgása valamely konstans F erő hatására:

A Stokes törvény alkalmazásakor feltételezünk egy, az m tömegű és D átmérőjű részecskére ható F konstans erőt:

$$m \frac{du}{dt} = F - 3\pi\eta Du / K_m$$

ahol u a relatív sebesség a részecske és a fluidum között. Mivel F és u ugyanabba az irányba mutatnak, így skalár mennyiségként kezelhetők.

Ha az erő $t=0$ és $u=0$ -ban ébred, t idő eltelte után a részecske sebessége:

$$u = FB(1 - e^{-t/\tau}),$$

ahol $B = K_m / 3\pi\eta D$ a részecske mechanikai mozgékonyága, és $\tau = m \cdot B$ a részecske relaxációs ideje. Bizonyos idő után az exponenciális tag elenyészővé válik és u eléri a $v_s = F \cdot B$ határsebességet.

τ idő elteltével a részecske sebessége a határsebesség $\left(1 - \frac{1}{e}\right)$ -ed részét éri el.

Az ülepedési határsebesség (mely gravitációból ered):

$$u_G = F_G B = mBg \left(1 - \frac{\rho}{\rho_p}\right)$$

ahol ρ a fluidum, ρ_p a részecske sűrűsége.

Levegőben 20 °C-on $D(\mu\text{m})$ átmérőjű gömbre:

$$\tau = 3,0 \cdot 10^{-6} \rho_p D^2 K_m \text{ (sec).}$$

Néhány érték egységnyi sűrűség esetén:

$D (\mu\text{m})$	$\tau \text{ (sec)}$
0,1	$8,64 \cdot 10^{-8}$
0,5	$9,94 \cdot 10^{-7}$
1,0	$3,48 \cdot 10^{-6}$
5,0	$7,74 \cdot 10^{-5}$
10,0	$3,05 \cdot 10^{-4}$

Még egy fogalom:

ha a Stokes törvény alkalmazható, akkor a részecske kezdeti impulzusának és mozgékonyágának szorzata a részecske ún. megállási távolsága (stopping distance):

$$S_0 = mu_0 B = \tau u_0.$$

1.3.3. Tehetetlenségi erő, impakció

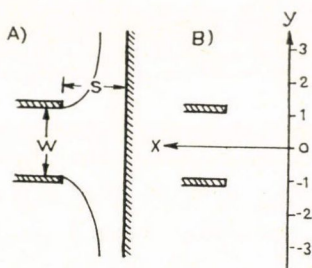
Ha az áramló aeroszolt valamely (szilárd) felület irányváltoztatásra kényszeríti, akkor a részecskék egy része, tehetetlenségük folytán, ezen felületnek ütközik. Ezt a jelenséget nevezzük impakciónak.

Amikor a levegő (fluidum) áram kezd irányt változtatni, relatív sebesség ébred a levegő (fluidum) és a részecskék közt (azok tehetetlensége miatt). A mozgásegyenlet:

$$m \frac{d\vec{u}}{dt} = \vec{v} - \vec{u},$$

ahol m a részecske tömege, B a mozgékonyága; \vec{u} a részecske, \vec{v} a fluidum sebessége.

A jelenség leírására nézzünk egy viszonylag egyszerű esetet: áramoljon az aeroszol egy W szélességű, hasáb alakú nyíláson át, egy a hasáb tengelyére merőleges, tőle S távolságban levő sík lemezre:



Az aeroszol áram két szimmetrikus ágra hasad, melyekben kellő távolság után az áramlási irány ellentétes lesz. A részecske trajektóriák eltérnek a levegő (fluidum) áramvonalaitól, és ha elegendő tehetetlenségük van, nekiütődnek a felületnek.

Ha a hasáb z irányban W -hez képest elég nagy, a feladat kétdimenziós. Így a részecskék mozgásegyenlete:

$$m \frac{du_x}{dt} = \frac{v_x - u_x}{B}$$

$$m \frac{du_y}{dt} = \frac{v_y - u_y}{B}$$

Az egyenletek dimenziómentessé tehetők, ha a sebességet u_0 (a zavartalan levegő-áram sebessége), az időt $W/2u_0$ (az az idő, ami alatt u_0 sebességgel $W/2$ utat fut be a részecske) egységekben adjuk meg. Így az egyenletek:

$$St \frac{d\tilde{u}_x}{dt} = \tilde{v}_x - \tilde{u}_x$$

$$St \frac{d\tilde{u}_y}{dt} = \tilde{v}_y - \tilde{u}_y,$$

ahol: a hullámvonal a dimenziómentességre utal és St paraméter az ún. Stokes szám:

$$St = 2mBu_0/W,$$

azaz a részecske S_0 megállási távolságának és $W/2$ -nek a hányadosa ($St=2 S_0/W$).

A fenti egyenleteket az $u_x^{(0)} = v_x^{(0)} = u_0$ és az $u_y^{(0)} = v_y^{(0)} = 0$ kezdetifeltételekre kell megoldani. Néhány egyszerűsített esetben ideális áramlást feltételezve az egyenletek analitikusan is megoldhatók, ezenkívül számos numerikus megoldást dolgoztak ki [23].

Az impakció mértéke igen jelentős lehet, ezért számos helyen alkalmazzák a levegő portalanítására. Az impakciós hatás alapján működik a Zebel és Hochrainer féle aeroszol spektrométer is.

1.3.4. A Brown mozgásból származó erő

Az aeroszol részecskék termikus egyensúlyban vannak a levegő molekuláival. Így átlagos energiájuk:

$$\frac{1}{2} m \overline{u_B^2} = \frac{3}{2} kT,$$

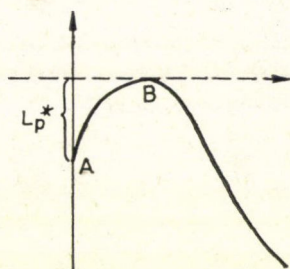
ahol k a Boltzmann állandó, T az abszolút hőmérséklet, m az aeroszol részecske tömege, és u_B a hőmozgásból adódó sebessége.

$$\text{Gömb alakú részecske esetén: } m = \rho_p \frac{4}{3} R^3 \pi = \frac{\rho_p D^3 \pi}{6}$$

$$\overline{u_B^2} = \frac{18 kT}{\pi \rho_p D^3}.$$

Egységnyi sűrűségű, $1 \mu\text{m}$ átmérőjű részecskére, 20°C -on $u_B = 0,48 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$ adódik.

A részecske pillanatnyi sebessége mind nagyság, mind irány szerint állandóan változik. A részecskék mozgására definiált közepes szabad úthossz (L_p):



L_p^* egyenlő a részecske valamely A pontból B pontig megtett útjának az A pontbeli sebességvektorára esett vetületével, s B az a pont, ahol a részecske sebességvektora először merőleges az A pontbeli sebességvektorra. Ekkor $L_p = \overline{L_p^*}$. Ez a távolság egyenlő a részecskének az átlagos termális sebességről a közegellenállási erő hatására bekövetkező megállási vagy fékezési távolságával. Gömb alakú részecskére:

$$L_p = \frac{K_m m u_B}{3\pi\eta D}.$$

Néhány érték L_p -re:

Részecskeátmérő (μm)	L_p (μm)
1	1,58
0,1	1,19
0,01	3,01

A részecske diffúzióoefficiense $\Delta = (kT/3\pi\eta D)K_m$. L_p -vel kifejezve:

$$\Delta = \frac{1}{8} \pi L_p u_B$$

(amely analóg a gázmolekulák közepes szabad úthosszára vonatkozó összefüggéssel). L_p összemérhető a gázmolekulák közepes szabad úthosszával, de az u_B sokkal kisebb részecskékre, mint molekulákra [23].

1.3.5. Egyéb erők

a) Elektrosztatikus erő

Egy q elektromos töltéssel rendelkező részecskére ható elektrosztatikus erő (F_E) valamely E elektromos térerősségű térben:

$$\vec{F}_E = \vec{E}q.$$

Ahhoz, hogy a részecskére \vec{F}_E hasson, nem szükséges, hogy szabad töltéssel rendelkezzen, ugyanis a külső tér polarizálhatja a részecskét.

Ha a külső tér nem homogén, az összefüggés sokkal bonyolultabb [23], pontosabban az összefüggés így is igaz, csak hogy a mennyiségek a helytől függőek lesznek.

b) Termikus erő

Ha a részecske hőmérsékletgradienssel rendelkező térbe kerül, akkor a részecskére még az ún. termikus erő (F_T) is hat, amely függ a részecske és a gáz hővezető-képességétől, a gáz nyomásától és hőmérsékletétől, egyenesen arányos a hőmérsékletgradienssel, valamint arányos a részecske átmérőjével (D), ha az sokkal nagyobb a gázmolekulák közepes szabad úthosszánál (λ), ill. D^2 -tel, ha D összemérhető λ -val (termidiffúzió).

Az aeroszolok stabilitásával kapcsolatos folyamat a *koaguláció* (azaz a részecskék összetapadása, egyesülése), amely során megváltozik a részecskék koncentrációja és méreteloszlása. Koaguláció kialakulhat, ha relatív sebesség lép fel a részecskék közt. Így eredete igen sokféle lehet, pl: Brown mozgás; gravitációs ülepedés, ha a részecskék közt a méret vagy sűrűségkülönbség jelentős; elektrosztatikus effektus; hőmérséklet gradiens; vagy akár ultrahang; ill. áramló aeroszoloznál a részecskék tehetetlenségéből adódó impakciós effektus.

Ha a részecske folyadékcsepp, akkor ütközéskor a koaguláció valószínűsége a felületi feszültség miatt nagy.

Összefoglalva, az aeroszolok dinamikai stabilitása az alábbiaktól függ:

- a) gravitációs effektus
- b) impakció
- c) Brown mozgás
- d) aggregáció
- e) elektrosztatikus effektus
- f) termikus kicsapódás
- g) egyéb tényezők.

1.4. Részecskeméret és részecskeméret-eloszlás

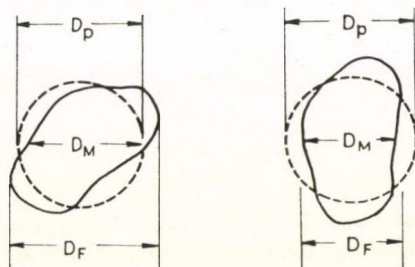
1.4.1. Lineáris részecskeméret definíciók

A reális részecskék általában szabálytalan alakúak, és így a részecskeméretet jellemző átmérő tulajdonképpen egy önkényes mennyiség.

Az irodalomban többféle részecskeméret definícióval találkozhatunk, melyek két csoportba sorolhatók.

Statisztikai jellegű geometriai átmérők

Az átmérők a részecske optikai vagy transzmissziós elektronmikroszkóppal készült képéhez kötődnek.



A Martin-féle átmérő (D_M) azon szakasz hossza, amely két egyenlő területre osztja a részecske képét és párhuzamos egy adott referencia vonallal.

A Feret-féle átmérő (D_F) a részecske kép profiljának hossza, valamely referencia irányból.

Vetületi-terület átmérő (projected area diameter) (D_p) azon kör átmérője, melynek területe azonos a részecske képének területével.

Ha a részecske nem gömb alakú, akkor D_M és D_F függ a részecske orientációjától.

Belátható, hogy $\bar{D}_F = \frac{\bar{P}}{\pi}$, ahol P a részecske képének kerülete; valamint, hogy szimmetrikus kép esetén a kép területe $A = \frac{\pi}{4} D_M^2$.

Egy szabálytalan alakú részecske felülete (S) négyszerese a részecske valamennyi lehetséges orientációjára átlagolt vetített területének (\bar{A}):

$$S = 4\bar{A} = \pi \bar{D}_p^2$$

A továbbiakban D_p -t D -vel jelölöm.

Nem statisztikus jellegű geometriai átmérők

Ha a részecskék a legnagyobb keresztmetszetüknek megfelelő irányba orientálódnak, akkor az ebből az irányból meghatározott vetített területből kapott geometriai átmérő Sisefsky szerint:

$$D_S = (lw^2)^{1/3},$$

ahol w a kép szélessége és l a hosszúsága (azaz w és l a kép legkisebb és legnagyobb mérete):

$$\text{a részecske térfogata pedig: } \frac{\pi}{6} D_S^3 = \frac{\pi}{6} lw^2.$$

1.4.2. Alak faktorok

A geometriai alak faktor (α_r) általános definíciója:

$$\alpha_r = \frac{A_r}{D^r},$$

ahol A a mértéke valamely részecsketulajdonságnak, amely D -nek a részecske átmérőjének r -edik hatványával arányos.

Térfogati alak faktor (α_3):

$$\alpha_3 = \frac{\bar{V}}{D^3}.$$

Felületi alak faktor (α_2):

$$\alpha_2 = \frac{\bar{S}}{D^2}.$$

Fény-extinkciós mérés esetén $\alpha_2 = \pi$, de pl. gáz adszorpciós mérésnél sokkal nagyobb érték adódik:

Aerodinamikai alak faktorok:

Láttuk, hogy ha a $Re < 0,3$, akkor valamely η viszkozitású fluidumban u relatív sebességgel haladó részecskére ható közegellenállási erő:

$$F_R = 3\pi\eta DK_R u,$$

ahol D a mért átmérő és K_R a közegellenállási alak faktor.

Ha u azonos a gravitációs határsebességgel és ha a csúszási faktor (K_m) egységnyi:

$$F_R = F_G = mg = \bar{V}\varrho_p g = \frac{\bar{V}}{D^3} \varrho_p D^3 g = \alpha_3 \varrho_p D^3 g,$$

így:

$$u = \frac{\alpha_3 \varrho_p D^2 g}{3\pi\eta K_R} = \frac{\varrho_0 D_A^2 g}{18\eta} = \frac{\varrho_p D_{st}^2 g}{18\eta}.$$

(A két jobb oldali tag is közvetlenül adódik a fenti egyenletekből, l. 1.3.2. fejezetet.)

Az egyenletben:

- ϱ_0 : az egységnyi sűrűség (használata D_A definíciója miatt szükséges),
 D_A : a részecske aerodinamikai átmérője
 (a vizsgált részecskével azonos határsebességgel ülepedő és egységnyi sűrűségű gömbalakú részecske átmérője),
 D_{st} : a részecske Stokes átmérője
 (a vizsgált részecskével azonos határsebességgel ülepedő és azonos sűrűségű, gömbalakú részecske átmérője).

A fenti egyenlethől:

$$\frac{D_A}{D} = \left(\frac{6}{\pi} \frac{\varrho_p \alpha_3}{\varrho_0 K_R} \right)^{1/2} \quad \text{és} \quad \frac{D_{st}}{D} = \left(\frac{6}{\pi} \frac{\alpha_3}{K_R} \right)^{1/2}$$

ill.: $\varrho_0 D_A^2 = \varrho_p \cdot D_{st}^2$, amelyből $\frac{D_A}{D_{st}} = \left(\frac{\varrho_p}{\varrho_0} \right)^{1/2}$;

ha D az ekvivalens térfogati átmérő:

$$\alpha_3 = \frac{\bar{V}}{D^3} = \frac{4}{3} \frac{\bar{R}^3 \pi}{D^3} = \frac{\pi}{6};$$

így ekkor a fenti egyenlet alapján:

$$K_R = \frac{D^2}{D_{st}^2},$$

régen ezt nevezték a részecske közegellenállási koefficiensének, de Fuchs nyomán „dinamikai alak faktor” a neve és χ -vel jelölik.

Gömbalakú részecskék esetén:

$$\alpha_3 = \frac{\bar{V}}{D^3} = \frac{4}{3} \frac{\bar{R}^3 \pi}{D^3} = \frac{\pi}{6}$$

$K_R = 1$ (definíciószerűen, l. a Stokes egyenletnél) így ekkor: $D_A = D \sqrt{\frac{\varrho_p}{\varrho_0}}$.

Az 1.2. fejezetben bevezetett CMD és CMAD mennyiségek között, tehát a következő összefüggés érvényes:

$$\text{CMAD} = \text{CMD} \sqrt{\frac{6}{\pi} \frac{\varrho_p \alpha_3}{\varrho_0 K_R}},$$

ami gömbalakú részecskékre:

$$\text{CMAD} = \text{CMD} \sqrt{\frac{\varrho_p}{\varrho_0}}$$

ill.

$$\text{MMAD} = \text{MMD} \sqrt{\frac{6}{\pi} \frac{\varrho_p \alpha_3}{\varrho_0 K_R}}$$

és gömbre:

$$\text{MMAD} = \text{MMD} \sqrt{\frac{\varrho_p}{\varrho_0}}$$

1.4.3. Részecskeméret eloszlások

Az 1.2. fejezetben már említettem, hogy az aeroszolkok általában log-normál eloszlást követnek, így csak ezen eloszlás tárgyalására térek ki.

Tehát: a részecske átmérő logaritmus normális eloszlást követ, azaz a sűrűségfüggvénye:

$$f(x) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu_0)^2}{2\sigma^2}},$$

ahol $x = \ln D$; $\sigma = \ln \sigma_g$ és $\mu_0 = \ln D_{0,g}$;

D : a részecske átmérő,

σ : a geometriai standard deviáció ($\ln D$ -re),

μ_0 : a normális eloszlás várható értéke.

A részecske átmérő eloszlás sűrűségfüggvénye már az aszimmetrikus log-normál eloszlás lesz. Mivel $d \ln D = \frac{1}{D} dD$ és $f(x)$ sűrűségfüggvény, így: $f(D) = \frac{1}{D} f(x)$.

A leggyakoribb átmérő (D_m):

$$\frac{df(D)}{dD} = 0$$

egyenletből közvetlenül adódik. A deriválással kapott eredmény:

$$D_m = D_{0,g} e^{-(\ln \sigma_g)^2}.$$

Hogy a különbözőképpen definiált átmérők közti összefüggéseket megkaphassuk, először számoljuk ki az átmérő r -edik hatványának várható értékét:

$$\overline{D_r} = \int_{-\infty}^{\infty} D^r f(\ln D) d \ln D = \int_{-\infty}^{\infty} e^{r \ln D} f(\ln D) d \ln D = D_{0,g}^r e^{\frac{r^2}{2} (\ln \sigma_g)^2}.$$

Ebből $r=1$ esetén az átlagos átmérő (D_1):

$$D_1 = D_{0,g} e^{1/2 (\ln \sigma_g)^2}.$$

(Az eloszlás aszimmetriájából adódik, hogy az átmérők átlaga (D_1) nem esik egybe CMD, azaz $D_{0,g}$ -vel.)

A következőkben keressük valamely $A_r = \alpha_r \overline{D^r}$ (l. 1.4.2. fejezet) részecske tulajdonság eloszlásához tartozó átlagos és medián átmérőket.

Az A_r tulajdonsághoz vezető eloszlás sűrűségfüggvénye:

$$g_r(x) = \frac{D^r}{\overline{D^r}} f(x);$$

az előzőek alapján:

$$\begin{aligned} g_r(x) &= f(x) \frac{D^r}{D_{0,g}^r e^{\frac{r^2}{2} (\ln \sigma_g)^2}} = f(x) \frac{e^{r \ln D}}{e^{r \ln D_{0,g}} e^{\frac{r^2}{2} (\ln \sigma_g)^2}} = \\ &= f(x) \exp \left(r \ln D - r \ln D_{0,g} - \frac{1}{2} r^2 (\ln \sigma_g)^2 \right) = \\ &= \frac{1}{(\ln \sigma_g) \sqrt{2\pi}} \exp \left(\frac{-(\ln D - \ln D_{0,g} - r (\ln \sigma_g)^2)^2}{2 (\ln \sigma_g)^2} \right). \end{aligned}$$

Tehát $g_r(x)$ szintén normális eloszlású, melynek várható értéke $(\ln D_{r,g})$:

$$\ln D_{r,g} = \ln D_{0,g} + r (\ln \sigma_g)^2$$

és szórása: $\ln \sigma_g$. (Ezek a Hatch—Choate egyenletek [1], [23]).

Így az A_r tulajdonsághoz tartozó átlagos átmérő $(\overline{D_r})$:

$$\overline{D_r} = \left(\frac{\overline{A_r}}{\alpha_r} \right)^{1/r} = D_{0,g} e^{\frac{r}{2} (\ln \sigma_g)^2}$$

és az A_r tulajdonsághoz tartozó medián átmérő $(D_{r,g})$:

$$D_{r,g} = D_{0,g} e^{r (\ln \sigma_g)^2}.$$

Valamint adódott, hogy ha egy részecskeszám szerinti eloszlás log-normál, akkor az A_r tulajdonság szerinti eloszlás is az.

Ha $r=3$, akkor $D_{r,g} = \text{MMD}$, így:

$$\text{MMD} = \text{CMD} e^{3(\ln \sigma_g)^2}.$$

vagy más alakban:

$$\lg \text{MMD} = \lg \text{CMD} + 6,9078 (\lg \sigma_g)^2$$

valamint, mivel D_A arányos D -vel

$$\text{MMAD} = \text{CMAD} e^{3(\ln \sigma_g)^2}$$

vagy más alakban:

$$\lg \text{MMAD} = \lg \text{CMAD} + 6,9078 (\lg \sigma_g)^2.$$

A geometriai standard deviáció (σ_g) az eloszlásgörbéből meghatározható. A normális eloszlás tulajdonsága, hogy ha u_0 a várható értéke és σ a szórása, akkor u_0 helyhez 50%-os gyakoriság és $u_0 + \sigma$ helyhez 84,13%-os gyakoriság tartozik.

Log-normál eloszlásnál, ha az abszcisszát logaritmikus léptékben rajzoljuk fel:

$$\sigma_g = \frac{84,13\% \text{ gyakorisághoz tartozó átmérő}}{50\% \text{ gyakorisághoz tartozó átmérő}}$$

ugyanis:

$$\ln \sigma_g = \ln D_{84,13\%} - \ln D_{50\%} = \ln \frac{D_{84,13\%}}{D_{50\%}}$$

$$\sigma_g = \frac{D_{84,13\%}}{D_{50\%}}$$

2. CÉLKITŰZÉSEK

Amint a bevezetésben már említettük, a kitűzött feladat végső célja a légzőrendszerben lejátszódó kiüledési (depozíciós) alapfolyamatok számítása és ezen elméleti modellek kísérleti úton történő ellenőrzése, majd a közvetlenül nem számítható elágazó rendszerek kiüledési tulajdonságainak kísérleti meghatározása az elméleti tudó modell számára.

Mindehhez először egészen egyszerű rendszereket kell vizsgálni, olyanokat, ahol még elég jól meg tudjuk állapítani az elméleti modellek eredményeinek pontosságát és ahol kísérleileg elég pontosan mérni tudjuk az egyes, depozíciót meghatározó, alapfolyamatokat külön-külön.

Ezen egészen egyszerű rendszereknek egyenes, vízszintes és ferde, ill. görbült, körkeresztmetszetű, adott átmérőjű és hosszúságú üvegcsöveket választottunk. A porok kiüledését a tüdőben a gravitációs üledés, az impakció és a Brown diffúzió határozzák meg. Az általunk használt kísérleti berendezés esetén, ezen folyamatokra — bizonyos elhanyagolások mellett — analitikus megoldások adhatók. A gravitációs hatásból származó depozíció számítására több modellt is kidolgoztunk.

1. Feltételeztük, hogy a részecskék követik a lamináris áramlásra jellemző paraboloid sebességprofil.

2. Feltételeztük, hogy a részecskék sebessége az áramlás átlagsebességével egyenlő az egész keresztmetszet mentén.

3. Mint látni fogjuk, durva becslésnek megfelel valamely adott magasságú és hosszúságú párhuzamos rétegre végzett számítás is.

4. A vízszintessel valamely α szöget bezáró — ferde — csövek esetére adódó összefüggés felállítása.

A kísérleteinkben alkalmazott aeroszol részecskeméret ($\sim 4 \mu\text{m}$ átmérő) esetén, a Brown diffúzióból adódó hatás elhanyagolható, így kísérletileg csak a gravitációs üledés és az impakció hatását tudtuk mérni.

3. AZ ELVÉGZETT SZÁMÍTÁSOK

3.1. Gravitációs üledés csövekben

Magáról a gravitációs üledésről, azaz az aeroszol részecskék mozgásáról gravitációs erő hatására már az 1.3. fejezetben írtam. Itt csak a mérések leírásához szükséges számításokról lesz szó.

3.1.1. Részecskék gravitációs üledése vízszintes csőben

Vízszintes, körkeresztmetszetű csőben való aeroszol áramlás esetén keressük a részecske kiüledési hányadot (Θ), a cső, a részecske és az áramlás paramétereinek függvényében.

Tegyük fel, hogy:

- a csőbe belépő aeroszol az egész keresztmetszetre azonos koncentrációjú,
- a részecskék, azonos és konstans határsebességgel ülepsznek,

- a részecskék tehetetlenek, azaz követik a levegőáram sebességeloszlását,
- az áramlás lamináris.

Legyen:

F : a részecskék azon hányada, mely nem ülepszik ki a csőben ($F = 1 - \Theta$),

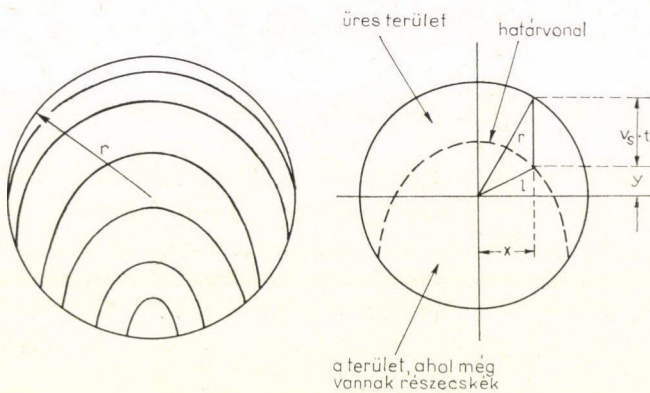
u : az átlagos levegőáramlási sebesség $\left(\frac{\text{m}}{\text{sec}}\right)$, [azaz a levegő áram $\left(Q\left(\frac{\text{m}^3}{\text{sec}}\right)\right)$ és a cső keresztmetszetének $(r^2\pi/\text{m}^2)$ hányadosa,

v_s : a részecskék ülepedési határsebessége (m/sec),

L : a vízszintes cső hossza (m),

r : a cső sugara (m),

t : idő (sec).



3.1.1.1. ábra

A 3.1.1.1. ábra mutatja a részecskék eloszlását a cső keresztmetszete mentén. A határréteg felett nincsenek egyáltalán részecskék, míg alatta a koncentrációjuk változatlan. A koordinátarendszer origója legyen a cső középpontjában és t legyen nulla a csőbe való belépéskor, azaz $L=0$ -nál.

Először írjuk fel a határvonal (azaz a határréteg keresztmetszeti képének) egyenletét:

Egy, a cső felső falától induló részecske x, y koordinátái valamely t időpillanatban:

$$y = \sqrt{r^2 - x^2} - v_s t. \quad (1)$$

Ezen idő alatt a részecske által vízszintes irányban megtett út (L):

$$L = \int_{t=0}^{t=t_1} v dt, \quad (2)$$

ahol v a vízszintes levegőáramlási sebesség, melynek eloszlása a keresztmetszet mentén

(l. 1.3. fejezet):

$$v = \frac{2u}{r^2} (r^2 - l^2), \quad (3)$$

ahol a 3.1.1.1. ábrából:

$$l^2 = x^2 + (\sqrt{r^2 - x^2} - v_s t)^2 \quad \text{és} \quad (4)$$

(2), (3), (4)-ből:

$$L = \int_0^{t_1} \frac{2u}{r^2} (2v_s t \sqrt{r^2 - x^2} - v_s^2 t^2) dt. \quad (5)$$

A t_1 idő (azaz amíg a részecske eléri az (x, y) pozíciót):

$$t_1 = \frac{\sqrt{r^2 - x^2} - y}{v_s}. \quad (6)$$

Az (5) kiintegrálva:

$$\begin{aligned} L &= \int_0^{t_1} \frac{2u}{r^2} \cdot 2v_s \cdot \sqrt{r^2 - x^2} \cdot t dt - \int_0^{t_1} \frac{2u}{r^2} v_s^2 t^2 dt = \frac{2uv_s}{r^2} \cdot \sqrt{r^2 - x^2} \cdot t_1^2 - \frac{2}{3} \frac{u \cdot v_s^2}{r^2} t_1^3 = \\ &= \frac{2u}{3r^2 v_s} [3 \cdot \sqrt{r^2 - x^2} \cdot (\sqrt{r^2 - x^2} - y)^2 - (\sqrt{r^2 - x^2} - y)^3] = \\ &= \frac{2u}{3r^2 v_s} (\sqrt{r^2 - x^2} - y)^2 \cdot (2\sqrt{r^2 - x^2} + y). \end{aligned} \quad (7)$$

A (7)-es egyenlet a határvonal egyenlete a cső kezdetétől L távolságra.

Legtávolabbra az $x=0$; $y=r$ koordinátájú részecske juthat, amely az $x=0$ és $y=-r$ pontban fog kiüledni: (7)-ből:

$$L_{\min} = \frac{8u \cdot r}{3v_s} = \frac{8Q}{3 \cdot \pi \cdot v_s \cdot r}. \quad (8)$$

L_{\min} az a legkisebb L hossz, amin belül valamennyi részecske ki fog üledni.

Ezek után nézzük hogyan számítható ki F , azaz a ki nem üledés mértéke L hosszúságú csőben. A ki nem üledett részecskék aránya (F):

$$F = \frac{Q_c}{Q}, \quad (9)$$

ahol Q_c a határréteg alatti és Q a teljes levegő áramban található részecskék száma.

Mivel a rendszer x -re szimmetrikus:

$$F = \frac{2}{Q} \int_{x_1}^{x_2} \int_{y_1}^{y_2} v dy dx. \quad (10)$$

Helyettesítve $Q = \pi r^2 u$ -t és v -t (3. egyenlet):

$$F = \frac{4}{\pi r^4} \int_{x_1}^{x_2} \int_{y_1}^{y_2} (r^2 - x^2 - y^2) dy dx. \quad (11)$$

Integrálva y szerint:

$$F = \frac{4}{\pi r^4} \int_{x_1}^{x_2} \left[(r^2 - x^2)y - \frac{y^3}{3} \right]_{y_1}^{y_2} \cdot dx. \quad (12)$$

Az integrálás felső határa (y_2) a határvonal egyenlete l. (7). Azonban ez az egyenlet nem oldható meg explicite y -ra, de (7)-ből:

$$\begin{aligned} \frac{3r^2 v_s L}{2u} &= y(\sqrt{r^2 - x^2} - y)^2 + 2\sqrt{r^2 - x^2} \cdot (\sqrt{r^2 - x^2} - y)^2 = \\ &= y^3 - 3y(r^2 - x^2) + 2(r^2 - x^2)^{3/2}, \end{aligned}$$

így:

$$(r^2 - x^2)y_2 - \frac{y_2^3}{3} = \frac{2}{3}(r^2 - x^2)^{3/2} - \frac{Lr^2 v_s}{2u}, \quad (13)$$

ahol a bal oldal azonos a (12) kifejezés zárójelen belüli részével; valamint az alsó határ y -ra (y_1) azonos a cső alsó részének kerületével:

$$y_1 = -\sqrt{r^2 - x^2}. \quad (14)$$

Ezeket (12)-be helyettesítve:

$$F = \frac{4}{\pi r^4} \int_{x_1}^{x_2} \left[\frac{4}{3}(r^2 - x^2)^{3/2} - \frac{Lr^2 v_s}{2u} \right] dx \quad \text{és} \quad (15)$$

integrálva:

$$F = \frac{4}{3\pi r^4} \left[x(r^2 - x^2)^{3/2} + \frac{3}{2} r^2 x(r^2 - x^2)^{1/2} + \frac{3}{2} r^4 \arcsin \frac{x}{r} - \frac{3Lr^2 v_s x}{2u} \right]_{x_1}^{x_2}. \quad (16)$$

Az x integrálási határok:

$$x_1 = 0 \quad (17)$$

és x_2 a határréteg vonalának és a kör kerület metszéspontjának x koordinátája; jelöljük ezt x_c -vel. Mivel

$$x_c^2 + (-y_c)^2 = r^2, \quad (18)$$

így ezt (7)-be helyettesítve, majd átrendezve, kapjuk:

$$x_c = \sqrt{r^2 - \left(\frac{3Lr^2 v_s}{8u} \right)^{2/3}} \quad (19)$$

és (17), (19)-ből:

$$-y_c = \sqrt{r^2 - x_c^2} = \left(\frac{3Lr^2 v_s}{8u} \right)^{1/3}, \quad (20)$$

valamint írhatjuk:

$$\frac{3Lr^2 v_s x_c}{2u} = \left(\frac{3Lr^2 v_s}{8u} \right) (4x_c) = 4x_c y_c^3. \quad (21)$$

Helyettesítve x_c -t és 0-t (16)-ba és felhasználva (20) és (21)-et:

$$F = \frac{4}{3\pi r^4} \left(-x_c y_c^3 - \frac{3}{2} r^2 x_c y_c + \frac{3}{2} r^4 \arcsin \frac{x_c}{r} + 4x_c y_c^3 \right), \quad (22)$$

átrendezve:

$$F = \frac{2}{\pi} \left(\frac{2}{r^4} x_c y_c^3 + \arcsin \frac{x_c}{r} - \frac{1}{r^2} x_c y_c \right), \quad (23)$$

illetve bevezetve az

$$\alpha = \left(\frac{3Lv_s}{8ur} \right)^{1/3}; \quad \beta = \sqrt{1-\alpha^2} \quad (24)$$

dimenziótlan paramétereket, írhatjuk:

$$F = \frac{2}{\pi} (\alpha\beta + \arcsin \beta - 2\alpha^3\beta); \quad (25)$$

ebből

$$\Theta = 1 - F \quad \text{alapján:}$$

$$\Theta = \frac{2}{\pi} \left(\frac{\pi}{2} + 2\alpha^3\beta - \arcsin \beta - \alpha\beta \right). \quad (26)$$

Belátható, hogy

$$\frac{\pi}{2} - \arcsin \beta = \arcsin \alpha, \quad (27)$$

azaz:

$$\frac{\pi}{2} = \arcsin \alpha + \arcsin \sqrt{1-\alpha^2}, \quad (28)$$

ugyanis:

$$\sin \frac{\pi}{2} = 1$$

és

$$\sin [\arcsin \alpha + \arcsin \sqrt{1-\alpha^2}] = \sin (\arcsin \alpha) \cdot \cos (\arcsin \sqrt{1-\alpha^2}) + \cos (\arcsin \alpha) \times$$

$$\times \sin (\arcsin \sqrt{1-\alpha^2}) = \alpha \cdot \alpha + \sqrt{1-\alpha^2} \cdot \sqrt{1-\alpha^2} = 1$$

Tehát

$$\Theta = \frac{2}{\pi} (2\alpha^3\beta + \arcsin \alpha - \alpha\beta), \quad (29)$$

bevezetve a $\mu = \alpha^3$ jelölést és mivel $d=2r$:

$\Theta_1 = \frac{2}{\pi} (2\mu \sqrt{1-\mu^{2/3}} + \arcsin \mu^{1/3} - \mu^{1/3} \sqrt{1-\mu^{2/3}})$
<div style="display: flex; justify-content: space-between;"> ahol $\mu = \frac{3v_s L}{4du}$ </div>

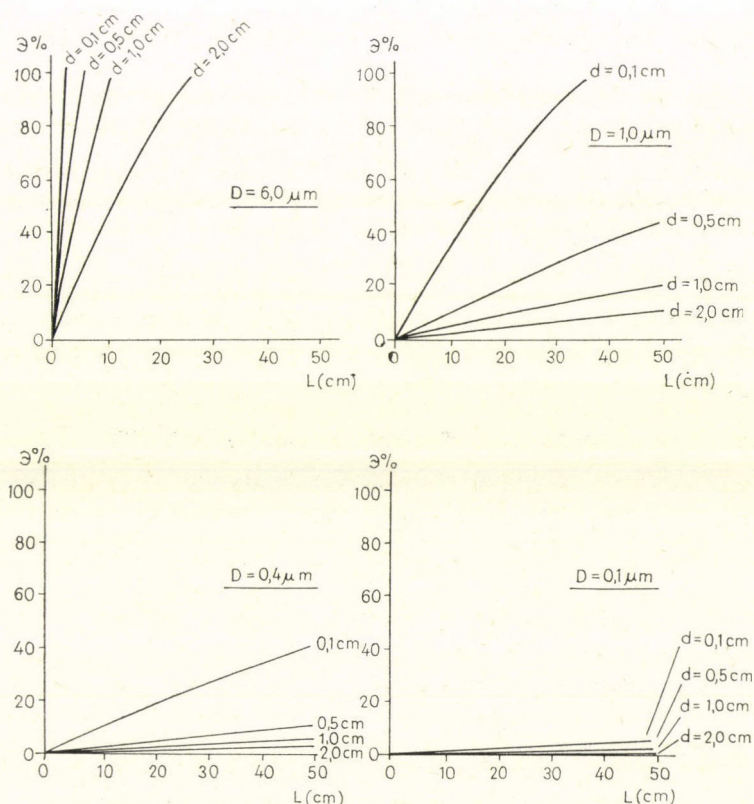
Megkaptuk tehát az aeroszol részecskék kiülepedésének mértékét gravitációs hatás alatt, lamináris áramlás esetére, a cső L hosszának, d átmérőjének az áramlás u átlagsebességének és a részecskeméretnek ($D^2 \sim v_s$) függvényében.

Turbulens áramlás esetén a feladat analitikusan nem oldható meg, mindössze néhány empirikus képlet található az irodalomban. Mivel kísérleteinkben az áramlás lamináris volt, ezért a továbbiakban ezzel a problémával nem is foglalkozom.

A fent kapott összefüggés alapján végzett számítások eredményeit mutatja a 3.1.1.2. ábra.

Az ábráról látható, hogy az $\Theta = f(L)$ függvény közel lineáris. Így Θ közel egyenesen arányos v_s -sel, (D^2 -tel) és L -vel, valamint közel fordítottan arányos d -vel és u -val. Az összefüggésből pedig adódik, hogy v_s és L , valamint hogy d és u analóg paraméterek, azaz az egyik bizonyos mértékű változása, Θ -ban ugyanolyan hatást eredményez, mint a másik ugyanolyan mértékű megváltozása.

Az $\Theta = f(v_s, D, L, d, u)$ függvény értékének kiszámítására PDP-11-34 számítógépre programot írtunk, melynek leírását lásd a függelékben. (ULEP és SETL nevű programok.)



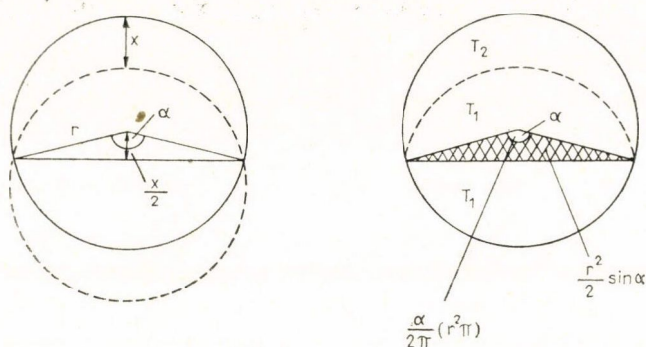
3.1.1.2. ábra. Az ábra a gravitációs kiülepedés mértékét mutatja. d átmérőjű, vízszintes, L hosszúságú cső mentén, D méretű és $\rho_p = 1,0 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ sűrűségű részecskékre, $u = 1 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$ -os átlagsebesség mellett

3.1.2. Egyéb számítások részecskék gravitációs ülepedésére vízszintes csőben

Az előző feladat lényegesen egyszerűbben megoldható, ha feltételezzük, hogy v az egész keresztmetszet mentén konstans és egyenlő u -val.

Ebben az esetben Θ egyenlő lesz a kialakult határvonal feletti területnek és a cső keresztmetszetének hányadosával, a cső keresztmetszeti képén.

A 3.1.2.1. ábrából egyszerű geometriai megfontolások alapján eljuthatunk az eredményhez:



3.1.2.1. ábra

A jobb oldali ábra alapján:

$$r^2\pi = 2T_1 + T_2, \quad (1)$$

$$\Theta = 1 - \frac{2T_1}{r^2\pi}, \quad (2)$$

$$T_1 = \frac{\alpha}{2\pi} \cdot r^2\pi - \frac{r^2}{2} \sin \alpha, \quad (3)$$

így

$$\Theta = 1 - \frac{2}{r^2\pi} \left(\frac{\alpha}{2} r^2 - \frac{r^2}{2} \sin \alpha \right) = 1 + \frac{\sin \alpha}{\pi} - \frac{\alpha}{\pi}, \quad (4)$$

míg a bal oldali ábrából:

$$\cos \frac{\alpha}{2} = \frac{x}{2r}, \quad (5)$$

jelöljük:

$$\frac{x}{2r} = q, \quad (6)$$

így

$$\alpha = 2 \arccos q. \quad (7)$$

Tehát (4) és (7) alapján:

$$\Theta = 1 + \frac{1}{\pi} \sin(2 \arccos q) - \frac{2}{\pi} \arccos q. \quad (8)$$

Belátható, hogy

$$\sin (2 \arccos y) = 2y\sqrt{1-y^2}, \quad (9)$$

ugyanis, legyen:

$$2 \arccos y = Z, \quad (10)$$

ekkor

$$y = \cos \frac{Z}{2} \quad (11)$$

és

$$\sin Z = \sin (2 \arccos y), \quad (12)$$

ugyanakkor a félszögek ismert összefüggése szerint:

$$\cos \frac{Z}{2} = \sqrt{\frac{1}{2}(1 + \cos Z)}. \quad (13)$$

A (11) és (13)-ból:

$$\cos Z = 2y^2 - 1, \quad (14)$$

valamint ismeretes, hogy

$$\sin Z = \sqrt{1 - \cos^2 Z}. \quad (15)$$

A (14) és (15)-ből:

$$\sin Z = \sqrt{1 - (2y^2 - 1)^2} = 2y\sqrt{1 - y^2}. \quad (16)$$

A (12) és (16)-ból:

$$\sin (2 \arccos y) = 2y\sqrt{1 - y^2}$$

és éppen ezt akartuk bizonyítani.

A (8) tehát így írható:

$$\Theta = 1 + \frac{2}{\pi} \varrho \sqrt{1 - \varrho^2} - \frac{2}{\pi} \arccos \varrho. \quad (17)$$

Most már mindössze csak ϱ -t kell a rendszer fizikai paramétereivel kifejezni.

Valamely t idő alatt a részecskék

$$x = v_s t \quad (18)$$

utat ülepszene, és ugyanezen t idő alatt

$$L = ut \quad (19)$$

úton haladnak előre a csőben.

(6), (18), (19)-ből:

$$\varrho = \frac{v_s L}{2ur}. \quad (20)$$

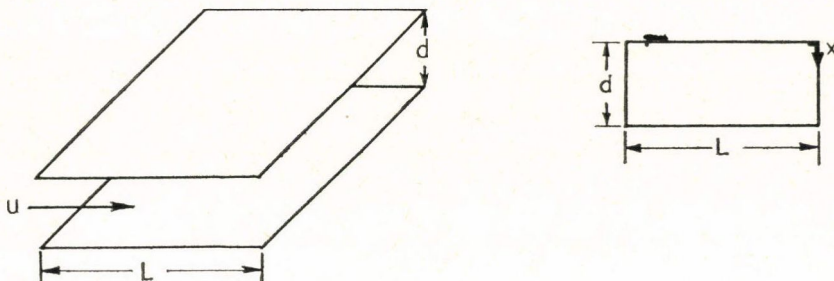
Tehát a keresett összefüggés:

$$\boxed{\begin{aligned} \Theta_2 &= \frac{2}{\pi} \left(\frac{\pi}{2} - \arccos \varrho + \varrho \sqrt{1 - \varrho^2} \right), \\ \text{ahol} \quad \varrho &= \frac{v_s \cdot L}{u \cdot d}, \end{aligned}}$$

amelyről hasonlók mondhatók, mint a 3.1.1. fejezetben kapott eredményről.

Ezen összefüggésre is írtam számítógépes programot, ami még megadja a két összefüggésből kapott Θ értékek különbségét is. (Lásd ULEP és SETL nevű programokat a függelékben.)

Végül nézzük valamely d magasságú vízszintes rétegben hogyan számolható a kiüledés mértéke (Θ).



3.1.2.2. ábra

Ha feltételezzük, hogy v az egész keresztmetszet mentén konstans és egyenlő u -val, akkor a 3.1.2.2. ábra alapján:

$$\Theta = \frac{x}{d}$$

ahol

$$x = v_s t$$

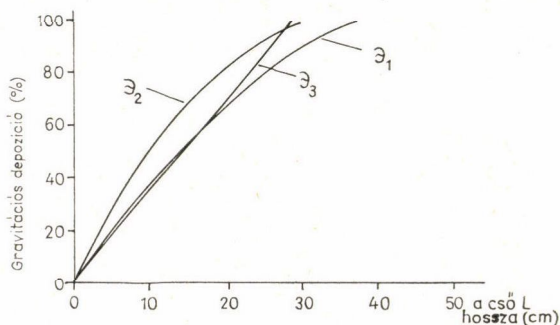
és

$$L = ut$$

Tehát

$$\Theta_3 = \frac{v_s L}{ud}$$

Belátható, hogy ugyanezen eredményt kapjuk, ha a pontos v sebességeloszlással számolunk [1].



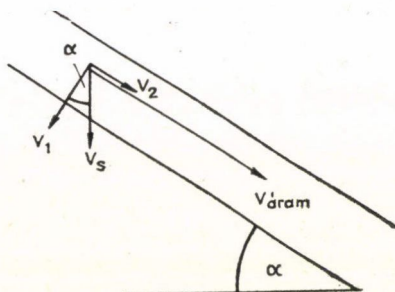
3.1.2.3. ábra

A 3.1.2.3. ábrán — amely a háromféle Θ összehasonlítására szolgál — látható, hogy Θ_1 , Θ_2 és Θ_3 aránylag jól egyeznek. Itt Θ_3 esetében a d magasságú vízszintes rétegre kapott összefüggést d átmérőjű csőre alkalmaztuk, helyesebben a számítások — amint az az ábráról is látható — azt mutatták, hogy az jól alkalmazható.

3.1.3. Részecskék gravitációs ülepedése a vízszintessel α -szöget bezáró csőben

Állítás: ha v_s helyett $v_{s,\alpha} = v_s \cdot \cos \alpha$ határsebességgel számolunk, az $\Theta = f(v_s, L, d, u)$ kifejezésben, akkor ezen közelítés 0,1 %-nál kisebb hibaforrást jelent a tüdőben uralkodó áramlási paraméterek esetében.

Ugyanis: bontsuk fel az ülepedő részecske \vec{v}_s sebességvektorát a cső falára merőleges és párhuzamos komponensekre (\vec{v}_1 és \vec{v}_2); l. 3.1.3.1. ábrát.



3.1.3.1. ábra

Az ábráról:

$$v_1 = v_s \cdot \cos \alpha,$$

mivel

$$v_{\text{áram}} \gg v_s \cong v_2,$$

(l. 1.1 és 1.3 fejezetek alapján) így

$$v_2 = v_s \cdot \sin \alpha$$

elhanyagolható.

Pl. $D = 6 \mu\text{m}$ részecskeátmérő esetén

$$\frac{v_s}{v_{\text{áram}}} = \frac{0,11}{150} = 7,3 \cdot 10^{-4} \quad \text{és} \quad v_2 \cong v_s,$$

$D = 0,4 \mu\text{m}$ részecskeátmérő esetén

$$\frac{v_s}{v_{\text{áram}}} = \frac{6,8 \cdot 10^{-4}}{1,3} = 5,2 \cdot 10^{-4} \quad \text{és} \quad v_2 \cong v_s.$$

Ha az áramlási rendszerünk nem ilyen, hanem $v_{\text{áram}}$ összemérhető v_2 -vel, az előző összefüggések akkor is alkalmazhatók, csakhogy:

$$u_\alpha = u(1 + \sin \alpha)$$

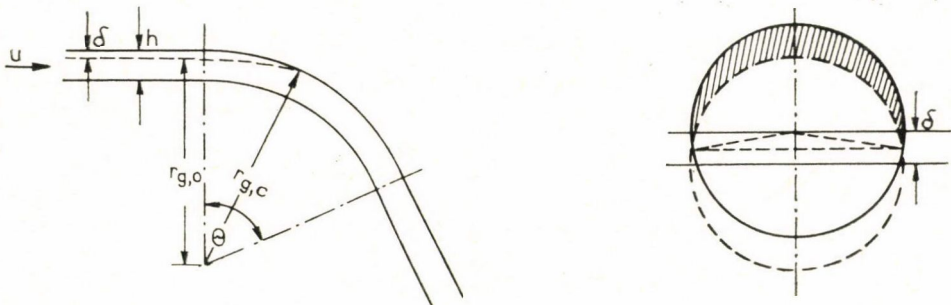
áramlási sebességgel kell számolnunk.

Természetesen a valóságban nem az ülededési határsebesség változik meg ferde cső esetén, hanem az ülededés útja lesz $\frac{1}{\cos \alpha}$ -szorososa.

3.2. Impakcióból származó depozíció számítása görbült csövekben

Magáról az impakcióról az 1.3.2. fejezetben már írtam. Itt csak arra keresek választ, hogy a kiülededés mértéke (Θ) hogyan számítható ki valamely körkeresztmetszetű, Θ szögben görbült csőben.

Legyen: az aeroszol monodiszperz és áramoljon laminárisan, valamely keskeny, párhuzamos síkok között, amelyek Θ (radián) szögben r_c görbületi rádiusszal kanyarodnak. A lemezek távolsága: h , és legyen $h \ll r_c$.



3.2.1. ábra

A kanyarban a részecskék mozgásegyenlete (Newton II. és a Stokes törvény alapján):

$$F = m \cdot a = m \cdot \frac{u^2}{r_g} = 6\pi\eta R v_r = 6\pi\eta R \cdot \frac{dr_g}{dt}, \quad (1)$$

ahol F az m tömegű részecskét gyorsító erő, „ a ” a szöggyorsulás, r_g a görbület sugara, u az áramlás sebessége, R a részecske sugara, η a fluidum viszkozitása és v_r a részecske fluidumhoz viszonyított sebessége.

(1)-ből:

$$dt = \frac{1}{u^2 \cdot \tau} \cdot r_g dr_g, \quad (2)$$

ahol

$$\tau = \frac{m}{6\pi\eta R} = \frac{\rho_p \cdot 4R^3\pi}{3 \cdot 6 \cdot \pi \cdot \eta R} = \frac{2\rho_p R^2}{9\eta}, \quad (3)$$

a ρ_p sűrűségű részecske relaxációs ideje.

Mivel u -t konstansnak tételezzük fel, integrálással:

$$t = \int_0^t dt = \frac{1}{u^2 \tau} \int_{r_{g,0}}^{r_{g,c}} r_g dr_g = \frac{1}{2u^2 \tau} (r_{g,c}^2 - r_{g,0}^2). \quad (4)$$

Ugyanakkor az idő, amit a mozgó részecske a kanyarzónában tölt, egyenlő a kanyar ívének hossza és az áramlás sebességének hányadosával:

$$t = \Theta \cdot \left(\frac{r_{g,c} + r_{g,0}}{2} \right) \cdot \frac{1}{u}. \quad (5)$$

(4) és (5)-ből:

$$r_{g,c} - r_{g,0} = \Theta \cdot u \cdot \tau = \Theta \cdot h \cdot \frac{u\tau}{h} = \Theta \cdot h \cdot st, \quad (6)$$

ahol $st = \frac{u\tau}{h}$ az ún. Stokes szám.

A kiüledés mértéke, a 3.2.1. ábra és (6) alapján:

$$\Theta = \frac{\delta}{h} = \frac{r_{g,c} - r_{g,0}}{h} = \Theta \cdot st, \quad (7)$$

természetesen:

$$\Theta = 1, \text{ ha } \Theta \cdot st \geq 1. \quad (8)$$

Ezek után nézzük, ha nem két párhuzamos lemez közt, hanem egy görbült csőben áramlik az aeroszol — esetet: most is legyen: $u = \text{konst}$ és $r \ll r_{g,c}$ (ahol r a cső sugara).

Amikor egy részecske áthalad a kanyar régióján, akkor az a centrifugális erő hatására $r_{g,c}$ irányban kifelé fog elmozdulni:

$$\delta = 2r \cdot \Theta \cdot st \quad (9)$$

távolsággal, ahol

$$st = \frac{u\tau}{2r}. \quad (10)$$

A kiüledés mértéke (Θ) egyenlő lesz a 3.2.1. ábrán besatírozott területnek és a cső keresztmetszetének hányadosával (l. 3.1.2. fejezetet is).

A feladat a továbbiakban teljesen analóg a 3.1.2. fejezetben tárgyalt első levezetéssel, itt az ottani x -nek δ felel meg.

Az ottani eredményeket felhasználva:

$$\Theta = 1 - \frac{2}{\pi} \arccos(\Theta \cdot st) + \frac{1}{\pi} \sin[2 \arccos(\Theta \cdot st)], \quad (11)$$

vagy más alakban (l. 3.1.2. fejezet):

$$\Theta = 1 - \frac{2}{\pi} \arccos(\Theta \cdot st) + \frac{2}{\pi} (\Theta \cdot st) \sqrt{1 - (\Theta \cdot st)^2}, \quad (12)$$

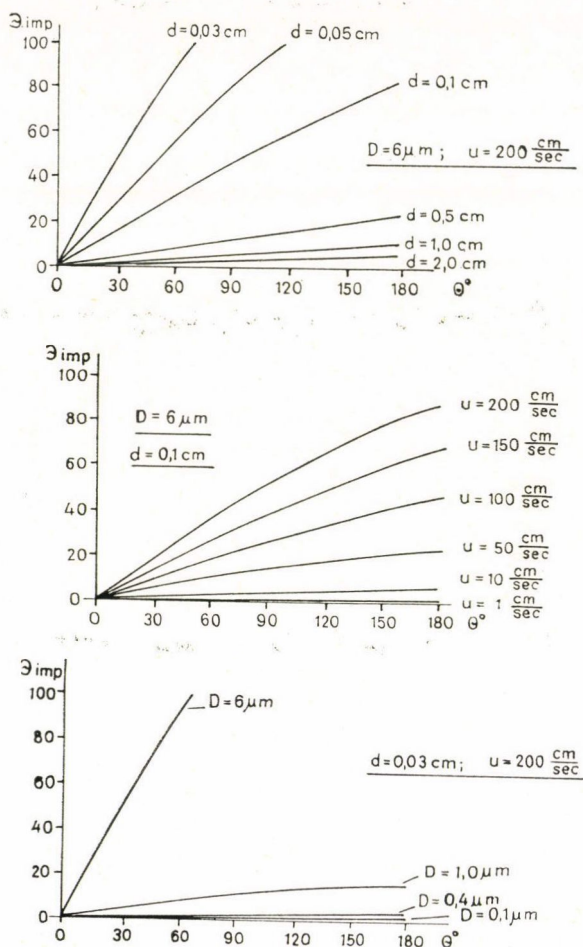
ahol Θ a cső görbületének szöge és

$$st = \frac{2\rho_p R^2 u K_m}{9\eta 2r} = \frac{\rho_p D^2 u K_m}{18\eta d},$$

melyben

d : a cső átmérője,
 D : a részecske átmérője,
 K_m : a Cunningham faktor,
 u : az áramlás sebessége.

A kapott összefüggésből számolt eredményeket mutatja a 3.2.2. ábra.



3.2.2. ábra. Az ábra az impakcióból származó kiüledés mértékét mutatja, valamely Θ° szögben görbülő, d átmérőjű csőben, u átlagsebességű áramlásnál, D aeroszol részecskeméret és $1 g \cdot cm^{-3}$ részecskesűrűség mellett

Az ábráról látható, hogy Θ_{imp} közel egyenesen arányos Θ ; u ; ϱ_p ; és D^2 -tel, valamint, hogy közel fordítottan arányos μ és d -vel.

Θ_{imp} kiszámítására is készítettünk számítógépes programot. Leírását l. a függelékben (IMPA és UUTK nevű programok).

3.3. A Brown diffúzióból származó depozíció számítása csövekben

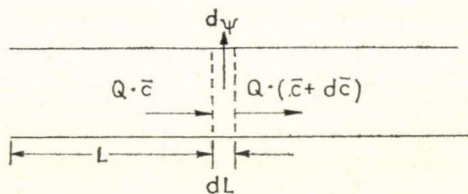
A tüdőben az aeroszolok kiüledését meghatározó harmadik, alapvető depozíciós folyamat a Brown diffúzió (l. 1.2. és 1.3.4. fejezeteket).

Az 1.2. fejezetben láttuk, hogy a diffúzióból származó depozíció csak a $0,1 \mu\text{m}$ -nél kisebb átmérőjű részecskék esetén lesz számottevő. Méréseinkben a $4 \mu\text{m}$ átmérőjű részecskékkel dolgoztunk, így a diffúziós hatást mérni nem tudtuk.

A diffúziós számítások igen bonyolultak, s néhány egyszerű esetet kivéve csak numerikusan oldhatók meg.

A legbonyolultabbak az összefüggések azokban az esetekben, ha a gravitációs üledésből és a Brown diffúzióból származó hatás összemérhető. Ilyenkor ugyanis a két folyamattal — mely természetesen egymástól nem független — szimultán kell számolni [27], [28]. Ezekre — mivel méréseinkben a diffúziós depozíció elhanyagolható — nem térek ki.

A diffúzióból eredő depozíció mértéke egyenes körkeresztmetszetű csövekben jól becsülhető a következő közelítéssel:



3.3.1. ábra

A cső falát érő tömeg fluxus:

$$J = \bar{c} \cdot k_m, \quad (1)$$

ahol \bar{c} az aeroszol részecske koncentráció és k_m a tömegátadási koefficiens, ill. valamely dF felületelemet ért fluxus:

$$d\psi = dF \cdot J = 2\pi r \cdot dL \cdot J = 2\pi r \cdot dL \bar{c} k_m = -Q d\bar{c}. \quad (2)$$

Itt tehát \bar{c} az átlagos részecske koncentráció dL környékén, Q az aeroszol áram értéke és L a cső hossza.

Átrendezve és integrálva (2)-t:

$$\int_0^L 2\pi r k_m dL = \int_{\bar{c}_0}^{\bar{c}} (-Q) \cdot \frac{1}{\bar{c}} d\bar{c}, \quad (3)$$

ahol $L=0$ -nál $\bar{c}=\bar{c}_0$ és $L=L$ -nél $\bar{c}=\bar{c}$.

(3)-ból:

$$\Theta = \frac{\bar{c}}{\bar{c}_0} = \exp\left(-\frac{2\pi r k_m L}{Q}\right) = \exp\left(-\frac{k_m 2r}{\Delta} \frac{\Delta \pi L}{u \pi r^2}\right) \quad (4)$$

 Sh -t bevezetve

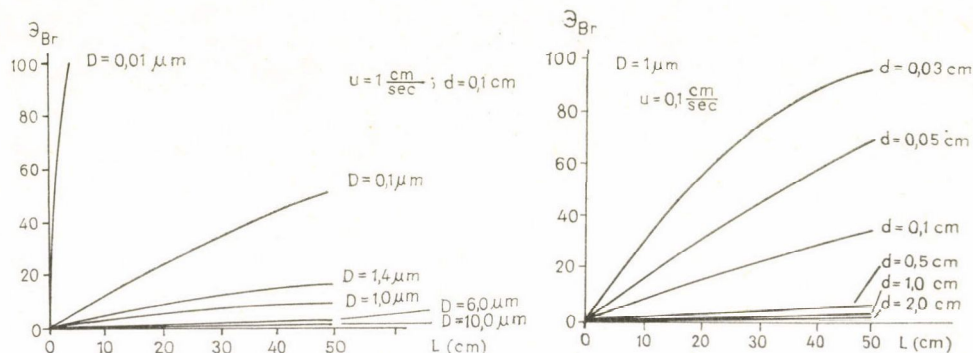
$$\Theta = \exp\left(-Sh \frac{\Delta L}{r^2 u}\right), \quad (5)$$

ahol Δ : a részecske diffúzióállandója levegőben, $\Delta = \frac{kT}{3\pi\eta D}$, melyben k : a Boltzmann állandó, T : az abszolút hőmérséklet, η a levegő viszkozitása, D : a részecske átmérője

$$Sh = \frac{k_m 2r}{\Delta},$$

 r : a cső sugara, L : a cső hossza, u : az áramlás sebessége, Sh : az ún. Sherewood szám.

Az irodalomban számos összefüggést találhatunk Θ -ra [1], [27]—[35]. A függelékben megadott számítógépes programok (ULEP és SETL nevűek) 5-féle összefüggésre adják meg Θ értékét, melyek azonban kevésbé térnek el egymástól. Ezek közül egyesek csak Θ bizonyos értékéig vagy értékétől érvényesek, l. ott.



3.3.2. ábra. Az ábra a Brown diffúzióból származó kiüledés mértékét mutatja, valamely d átmérőjű cső L hossza mentén, u átlagsebességű áramlásnál, D aeroszol részecskeméret mellett

A 3.3.2. ábra Thomas számításainak [29] eredménye, azaz az

$$\Theta_2 = 1 - 0,819 \cdot e^{-1,828\mu} - 0,097 \cdot e^{-11,15\mu} - 0,032 \cdot e^{-28,5\mu} - 0,027 \cdot e^{-61,5\mu} - 0,025 \cdot e^{-375,0\mu},$$

$$\mu = \frac{2\Delta L}{r^2 u}$$

összefüggés alapján számolt görbéket mutatja (ULEP-ben PP3 és SETL-ben AP3 nevű eredmények).

A 3.3.2. ábráról látható, hogy Θ_2 közel egyenesen arányos a cső hosszával (L) és közel fordítottan arányos a csőátmérő négyzetével (d^2), az áramlás sebességével (u), és a részecske átmérőjével (D).

Áttekintve a három — tüdő depozíciót meghatározó — alapfolyamatot, mondhatjuk:

kis részecskeméretnél — a Brown depozíció növekedik,

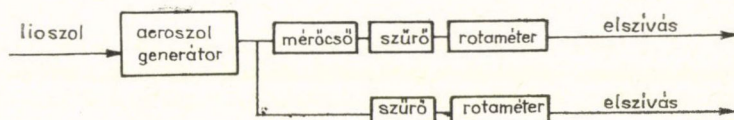
kis áramlási sebességnél — a gravitációs és a Brown depozíció növekedik és

kis csőátmérőnél — mindhárom depozíció növekedik.

4. AZ ELVÉGZETT KÍSÉRLETEK

Amint a második fejezetben már említettem, az elvégzett kísérletek célja a légzőrendszerben lejátszódó depozíciós alapfolyamatok modellezése volt. Pontosabban egy olyan kísérleti berendezés összeállítása, melyben a fenti folyamatok mérhetők. Így a végzett kísérleteink tulajdonképpen csak előkísérletek, a pontos kísérleti módszer kifejlesztéséhez.

A berendezés blokkdiagramja:



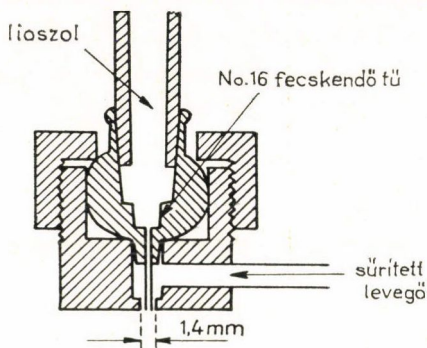
A berendezés, és így a mérés is igen sokat változott a jelenlegi formájáig.

A líoszorból az aeroszolt először egy ultrahangos generátorral állítottuk elő, melyet egy 30 l térfogatú acéltartályba vezettünk. A tartályba egy β^- forrást helyeztünk, hogy a részecskék elektrosztatikus feltöltöttségét megszüntessük, valamint egy kis teljesítményű ventilátort, hogy az aeroszol leülepedését meggátoljuk. Úgy gondoltuk, hogy először megtöltjük a tartályt aeroszollal, majd az aeroszol generálás megszűnte után vezetjük csak át az aeroszolt a mérőcsövön. A kísérlet eredménye azonban negatív volt, egyszerűen sem a szűrőn, sem a mérőcsövön nem mértünk kiülepedést. Majd később kiderült, hogy magából a tartályból sem jön ki részecske, ezért a tartályt kiiktattuk a rendszerből.

Ezen rendszerrel pontosan kellett mérni a percnként elpárolgott líoszol mennyiséget a túltelítettség meggátolása végett; ugyanis ekkor köd formájában folyadék csapódhat ki a részecskékre és így átmérőjük megnövekedvén, gyorsabban ülepednének. Ezért, és hogy a folyadék cseppeknek legyen idejük elpárologni, a mérőcső és a generátor közé egy hosszú, függőleges csövet is beépítettünk, melyet később még a párolgás fokozása végett a mérőcsővel együtt termosztátba ($\sim 60^\circ\text{C}$) is helyeztünk. Majd vizes oldat helyett etanolos oldószerre tértünk át. Részecskét azonban a várthoz képest csak elhanyagolható mennyiségben találtunk a mérőcsőben és a szűrőn. Ezek után közvetlenül a generátor után tett szűrő segítségével megbizonyosodtunk, hogy magából a generátorból sem jön ki megfelelő mennyiségű részecske. Így új típusú generátor után kellett néznünk. Végül az *R. F. Hounam*,

A. Black és M. Walsh által ajánlott generátor [36] bizonyult jónak, s a továbbiakban a méréseket ezzel végeztük. Működési elve a festékszóró pisztolyéhoz hasonló (4.1. ábra).

A cikkben ajánlottól mindössze annyiban térünk el, hogy nem 16-os, hanem 17-es számú injekcióstűt építettünk be a készülékbe, ugyanis így — mivel ez vékonyabb tű (a létező legvékonyabb) — a keletkező aeroszol részecskék is kisebbek lesznek. Fennáll ugyan az eldugulás veszélye, de minden mérés utáni kitisztítással ez elkerülhető.



4.1. ábra. A generátorfej szerkezete

A komprimáltlevegő-áram mennyiségét a nitrogén palack után bekötött rotaméterrel mértük. Az aeroszol generáláshoz ~ 600 l/h N_2 áram bizonyult megfelelőnek.

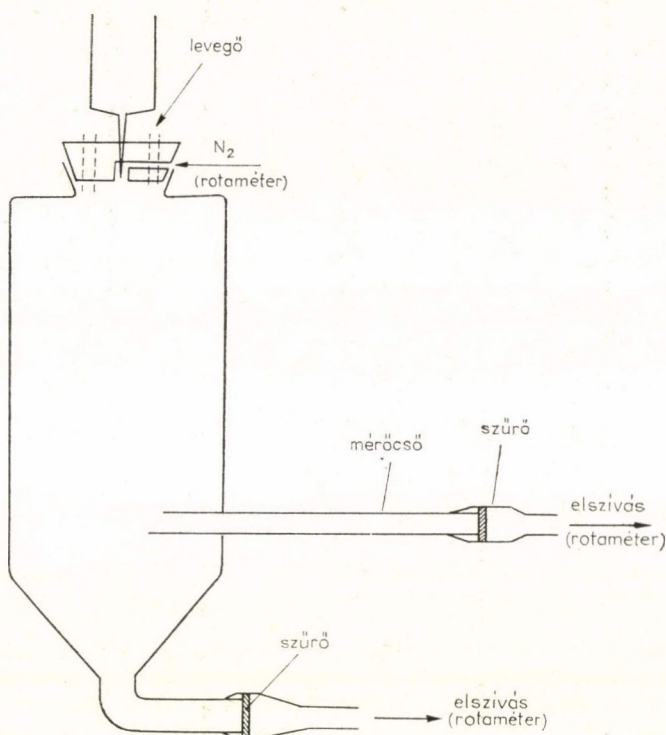
A berendezés utolsó verziójában a generátorfejhez egy — természetesen függőleges tengelyű — 60 cm hosszú és 14 cm átmérőjű üvegcső csatlakozik, melynek alsó elkeskenyedő vége előtt helyezkedik el a mérőcsövek csatlakozására szolgáló nyílás (4.2. ábra).

Ezen függőleges csőhöz alulról csatlakozik egy megsemmisítő szűrő és rotaméter után, a vákuumszivattyú pufferalackja.

Maga a mérőcső kb. 60 cm hosszú, adott belső átmérőjű üvegcső, melynek belső falára a részecskék odatapadását biztosító ragasztóanyagot vittünk fel. A generátor függőleges oszlopába nyúló végét a függőlegeshez $\alpha = 45^\circ$ -ban vágtuk le (a felépő turbulencia csökkentése végett). Másik végéhez pedig, közvetlenül csatlakoztattuk a szűrőt (GF/A üvegszálas szűrő), amelyhez egy rotaméter közbeiktatásával a vákuumszivattyú pufferalackját csatlakoztattuk.

Az aeroszolt azért kell a mérőcsövön kívül még egy helyen elvezetni, mert egyrészt maga a generátorfej megszab egy minimális levegőáramot, s nekünk a mérőcsőben ennél kisebbre lehet szükségünk, másrészt így magának a generált aeroszolnak a minősége is állandó, azaz nem befolyásolják a mérőcső áramlási paraméterei.

Maguk az aeroszol részecskék $\sim 4 \mu\text{m}$ átmérőjű, $1,15 \text{ g/cm}^3$ sűrűségű, mikro anioncserélő gömbök, melyek sztirol és kevés divinil-benzol emulziós polimerizációjával készültek, majd anioncserélő trimetil ammónium aktív csoportot vittek fel rá. (A mikro ioncserélőt Erdélyi Árpád (Nitrokémia, B.fűzfő) bocsátotta rendelkezésünkre.)



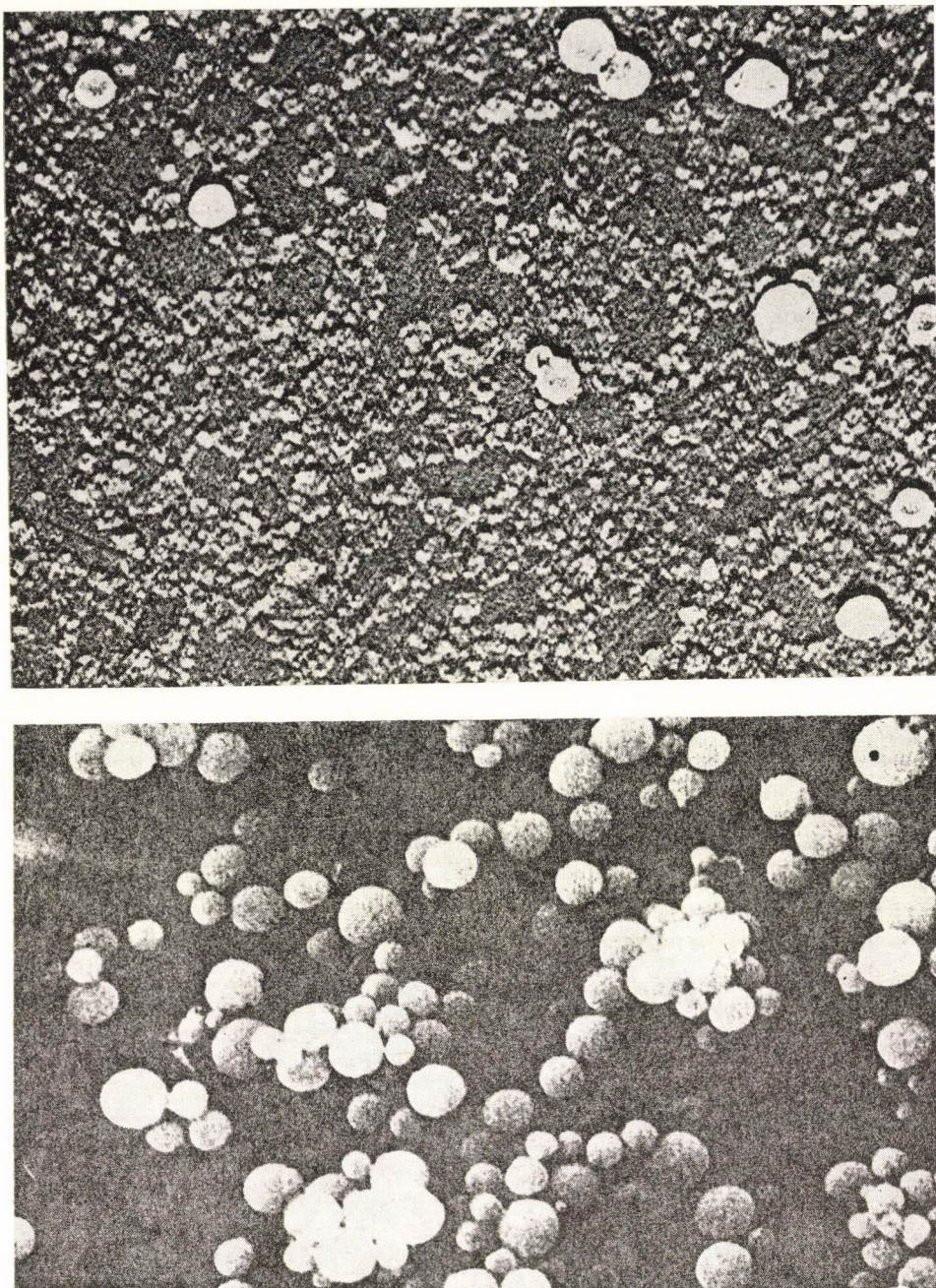
4.2. ábra. A mérőberendezés vázlata

Ahhoz, hogy a kiülepedés mértékét mérni tudjuk, a részecskéket radioaktív anyaggal nyomjelezni kell, ugyanis a kiülepedett részecskék összmenyisége rendkívül kicsiny. Nyomjelzésre ^{99m}Tc izotópot alkalmaztunk, melynek felezési ideje 6,02 h; 140,5 keV és 142,6 keV energiájú γ -fotonok kibocsátásával bomlik. Az izotópot izotóniás (7–10 mg/ml NaCl-ot tartalmazó) NaTcO_4 oldat formájában az MTA Izotóp Intézetétől kaptuk.

A nyomjelzésnél nehézséget jelent, hogy a pertechnát anion bár jóval erősebben kötődik az ioncserélőhöz, mint a klorid, azonban a klorid ion relatív nagy koncentrációja miatt leszorítaná a hordozómentes pertechnátot. Ezért a Cl-ot AgCl formájában Ag_2O -al lecsaptuk.

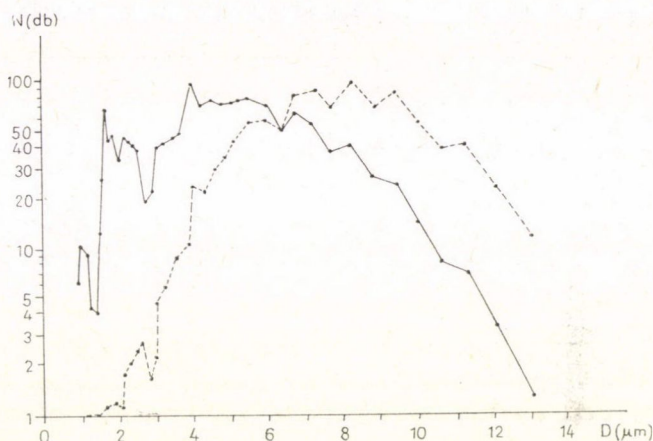
Arról, hogy a ^{99m}Tc valóban a részecskében és nem az oldatban van, ultracentrifugálással győződünk meg. Centrifugálás után szétválasztva a részecskéket az oldattól, aktivitás méréssel meggyőződünk, hogy a ^{99m}Tc -nak több mint 95%-a a részecskékhez kötött. (A nyomjelzett mikroioncserélők aeroszol kutatásban való alkalmazását Fehér István vetette fel.)

Mivel a számításokhoz szükséges a részecskék mérete, ezért azokról scanning elektronmikroszkópos felvételeket készítettünk, l. a 4.3. ábrát. A bal oldali felvétel a lioszról, a jobb oldali a kiülepedett aeroszorról készült, amelyről látható, hogy a részecskék valóban gömb alakúak, s hogy az aggregáció mértéke nem számottevő.



4.3. ábra. A lioszolról (fent) és a kiüledett aeroszol részecskékről (lent) készült elektronmikroszkópos felvételek

TGZ—3 optikai részecskeméret analízátorral meghatározott több mint ezer részecskeméret alapján rajzolt differenciális részecskeméret eloszlást (folytonos vonal) és a differenciális tömeg szerinti eloszlást (szaggatott vonal) mutatja a 4.4. ábra, mely tulajdonképpen D^3 eloszlás, hiszen a részecskék tömege átmérőjük köbével arányos. (A D^3 eloszlás ismeretére azért van szükség, mert a részecskéket tömegükkel arányosan nyomjeleztük, azaz valamely részecske aktivitása a tömegével arányos.)



4.4. ábra. Differenciális részecskeméret (D) eloszlás (folytonos vonal), és differenciális részecsketömeg (D^3) eloszlás (szaggatott vonal)

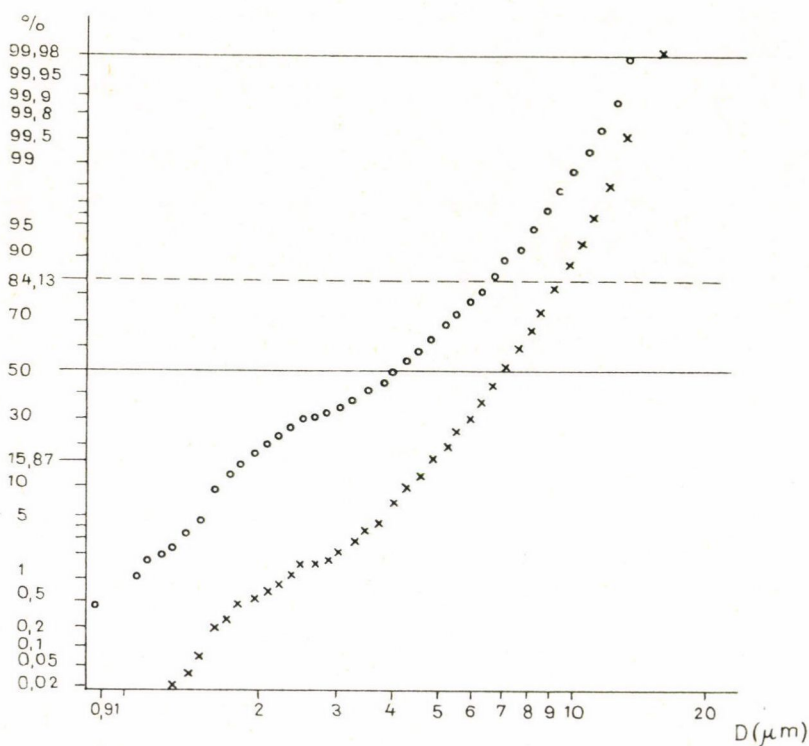
A részecskeméret analízátorral mért adatokat tartalmazza a 4.1. táblázat. Az egyes részecskeméretekhez tartozó darabszámok — mint látható — nem egész számok. Ennek oka, hogy az analízátor nem ekvidisztáns, hanem exponenciális mérettartományokba sorolja be a részecskéket, hogy a kisebb méreteknél a részecskeméret tartományok is kisebbek legyenek, azaz finomabb legyen a felosztás. Ebből következik, hogy az így besorolt darabszámokat egy korrekciós faktorral be kell szorozni.

Mint az 1.4. fejezetben már említettem, ha a részecskeméret eloszlásfüggvényét log-normál papíron rajzoljuk fel, egyenest kell kapnunk. A 4.1. táblázat adatai alapján szerkesztett számszerinti és tömegszerinti részecskeméret eloszlásfüggvényt mutatja a 4.5. ábra, melyből CMD, MMD és σ_g meghatározhatók.

Az ábráról látható, hogy 2,5 μm körül a függvények képen törés van, amelyhez a tömeg szerinti eloszlásnál 1,7%, a számszerinti eloszlásnál pedig 30% körüli érték tartozik. E felett a görbék, jó közelítéssel, valóban egyenesnek mondhatók. Az eloszlás paramétereinek pontosabb meghatározása végett, a két eloszlásgörbét a legkisebb négyzetek módszerével egyenest illesztettünk (melyhez az egyes standard —

4.1. TÁBLÁZAT

$D(\mu\text{m})$ korr. db szám	0,9 6,33	1,09 10,46	1,16 9,80	1,24 4,59	1,32 4,30	1,4 12,09	1,5 26,32	1,6 70,40	1,72 46,62	1,82 49,28	
$D(\mu\text{m})$ korr. db szám	1,96 34,68	2,08 48,96	2,22 45,54	2,38 43,02	2,54 40,14	2,7 20,90	2,88 23,52	3,08 40,26	3,28 42,75	3,5 48,60	
$D(\mu\text{m})$ korr. db szám	3,74 49,83	4,00 93,72	4,26 72,60	4,56 75,64	4,84 73,08	5,18 76,30	5,54 77,83	5,9 69,12	6,28 51,30	6,72 65,52	
$D(\mu\text{m})$ korr. db szám	7,18 58,46	7,66 37,74	8,18 42,09	8,74 26,00	9,32 24,40	9,94 14,25	10,62 7,95	11,34 7,00	12,10 3,29	12,92 1,32	15,7 0,36



4.5. ábra. A részecskeméret szám szerinti (pontok) és tömeg szerinti (keresztek) eloszlása log-normál léptékű ábrázolásban

normális — eloszlásfüggvény értékeket táblázatból kerestük ki). A görbeillesztést a 3 μm feletti értékekre végeztük, melynek eredménye:

a számszerinti eloszlásfüggvény alapján:

$$\text{CMD} = 4,2 \mu\text{m},$$

$$\sigma_{g1} = 1,4$$

a tömegszerinti eloszlásfüggvény alapján:

$$\text{MMD} = 6,7 \mu\text{m}.$$

$$\sigma_{g2} = 1,4.$$

A megfelelő aerodinamikai átmérő:

$$\text{CMAD} = 4,5 \mu\text{m}$$

$$\text{MMAD} = \text{AMAD} = 7,1 \mu\text{m}.$$

A depozíciós számításoknál a következőképpen jártunk el:

A részecskeméret tartományt n részre osztottuk, s az egyes tartományokhoz tartozó százalékos gyakorisági súlyokkal (k_i) szoroztuk a tartomány középpontjához tartozó átmérőből számolt depozíció értékeket (Θ_i). Ezek összege adja meg az adott részecskeméret eloszlású rendszer Θ értékét, azaz:

$$\Theta = \sum_{i=1}^n k_i \Theta_i.$$

A részecskeméret tartományt a következő $n=11$ részre osztottuk:

< 3,5; 3,5—4,5; 4,5—5,5; 5,5—6,5; 6,5—7,5; 7,5—8,5; 8,5—9,5;

9,5—10,5; 10,5—11,5; 11,5—12,5; > 12,5 μm

az egyes tartományokhoz rendelt részecskeméreteket (D_i) rendre: 2; 4; 5; 6; 7; 8; 9; 10; 11; 12; 13 μm .

A hozzájuk tartozó súlyokat a tömegszerinti eloszlásból a legkisebb négyzetek módszerével illesztett egyenes által a standard — normális — eloszlásfüggvény táblázata segítségével kapott gyakoriságértékek különbsége adja meg. A kapott eredmények rendre:

2,88; 9,30; 15,90; 18,21; 16,42; 12,76;

9,00; 5,95; 3,77; 2,33; 3,48%.

Ezt figyelembe véve működnek a függelékben közölt számítógépes programok (SETL, UUTK).

Mint már említettem, a mérőcső belső falát valamely ragasztóanyaggal kell bevonni, a kiüledett részecskék megfogása végett. Először benzinben oldott vazelin, majd benzinben és a legkülönbözőbb oldószerekben oldott — direkt az aeroszolk megkötésére használt — szintetikus ragasztóval próbálkoztunk. Azonban az oldószer elpárolgása után, sohasem maradt a felületet teljesen beborító ragasztóréteg, hanem az „kis cseppekbe” húzódott össze. Ennek várható következménye —

a mérési eredményt illetően az —, hogy a számítottnál kisebb fokú depozíciót mérünk, ugyanis a kiülepedett, de nem odatapadt részecskét a levegőáram kifújhatja a csőből.

Ezek után leírom egy konkrét mérés menetét:

Ag_2O készítése:

4,6 ml 5%-os AgNO_3 -at 15 ml-re hígítunk vízzel, majd ehhez 16 ml 0,1 N NaOH oldatot öntünk, keverés és ülepedés után a csapadékot dekantáljuk, majd 3×15 ml vízzel mossuk (dekantálva).

Az aktív anyag fiolájának felbontása és az ezüstoxid csapadék hozzáadása, majd néhány perces rázás után az oldatot állni hagyjuk, hogy a csapadék leülepedjen.

A mikro-anioncserélő gyantából $4 \cdot 10^{-3}$ %-os vizes szuszpenziót készítünk, amelyből 50 μl -t és az aktív oldatból is 50 μl -t egy 2 ml etanolt tartalmazó kémcsőbe pipettázunk.

Az oldatot ultrahangos aeroszol generátorral jól felkevertetjük.

Összeállítjuk magát a mérőberendezést: bekapcsoljuk a vákuumszivattyút, a rendszerbe bekötjük a ragasztóanyaggal már bevont mérőcsövet, behelyezzük a szűrőket, beállítjuk a megfelelő áramlási értékeket a rotamétereken, majd meggyőződünk, hogy a rendszer nem ereszt-e valahol. Ezek után bekapcsoljuk a kb. 600 l/h-s N_2 áramot.

A letisztított generátorfejbe beöntjük az ultrahangos generátorral újra felkevert $^{99\text{m}}\text{Tc}$ -al nyomjelzett mikroioncserélő lioszol szuszpenziót.

Ha a 2 ml mérőoldat már átment a generátor tűjén, (kb. 5 perc) akkor a mérőcsőben a levegő áramot lezárjuk és a generátorfejbe kb. 1 ml tiszta etanolt öntünk, majd valamely, a generátor tűjénél vékonyabb dróttal a tűt kitisztítjuk.

Ezek után elzárjuk a készülék még nyitva levő csapjait, majd a mérőcsövet és a végén levő szűrőt leszereljük.

Ezt követően 1—1 kémcsőbe mossuk benzinnel és benzines vattával a mérőcsőben, ill. a szűrőben kiülepedett anyagot. (A mérőcsövön elegendő kétszer átnyomni 1—1 jól záró benzines vattacsomót. A szűrőnél azonban nem elegendő egyszerűen a szűrőpapírt betenni a kémcsőbe, hanem benzines vattával a szűrőtartó valamennyi alkatrészét át kell törölni, s a vattát is a kémcsőbe tenni.) Természetesen a mérőcső, ill. a szűrő kimosásának eredményességéről azok aktivitásmérésével meg kell győződni; míg a ki nem mosott aktivitás már nem összemérhető a kimosottal.

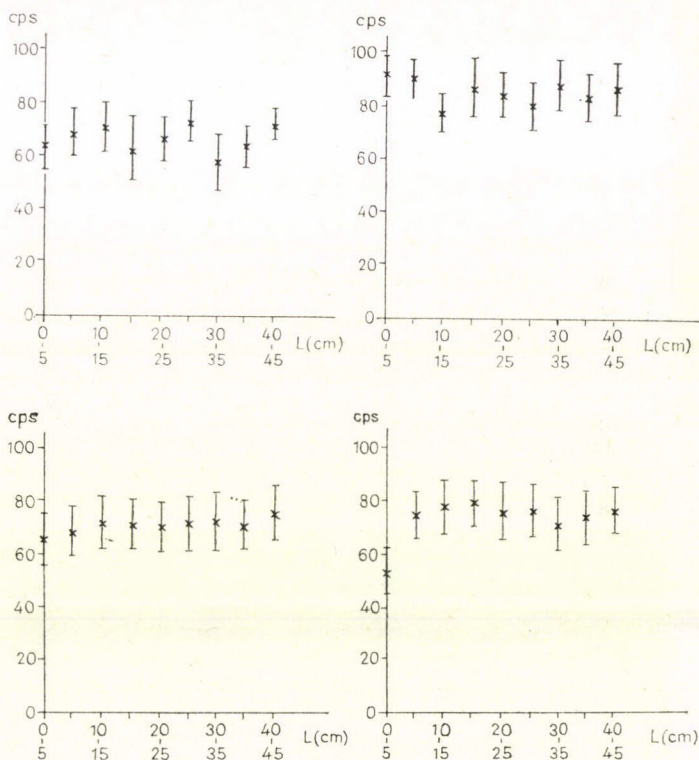
Majd megmérjük a két kémcső aktivitását. (Vigyázni kell, hogy a két kémcsőben levő aktív anyag eloszlása a kémcsőveken belül közel azonos legyen, hogy a detektálás határfoka ne különbözzék. Ez úgy érhető el, hogy a vatta és szűrőpapír darabokat üvegbottal a kémcső aljára nyomjuk, valamint ügyelünk arra, hogy a kémcsőveken belül közel azonos, de mindenesetre nem túl sok anyag legyen.)

Ha a mérendő aktivitás túl nagy, akkor — lévén, hogy a $^{99\text{m}}\text{Tc}$ felezési ideje 6,02 h — az belátható időn belül már mérhető lesz.

Az aktivitásméréseket alacsonyháttérű mérő dobozban (AHMED) levő üreges szcintillációs detektorral végeztük.

5. EREDMÉNYEK

Az első méréseknél a mérőcsövet 5 cm-es darabokra vágtuk, hogy a cső hossza mentén a depozíció differenciális eloszlását is megkapjuk. Amint az 5.1.a, b, c, d ábrák mutatják, a mért pontokra egy, az abszcisszával párhuzamos egyenes illeszthető, azaz az $\Theta=f(L)$ függvény a mérési hibán belül lineáris. (Természetesen csak nem túl nagy Θ , vagy L értékekig, hiszen egy bizonyos L érték után már nincs is kiülepedés). Ezen mérések alapján vált bizonyossá, hogy nincs szükség minden esetben felvenni a differenciális görbét, azaz a továbbiakban a mérőcsövet nem kell 5 cm-es darabokra szelni, s azok aktivitását külön-külön megmérni. A további kísérletekben csak a mérőcsőben kiülepedett, összes aeroszol mennyiséget mértük.



5.1.a, b, c, d ábra. A depozíció differenciális eloszlása a cső L hossza mentén. (Az ordinátán az 5 cm-es mérőcső szeletek aktivitását tüntettük fel, CPS = counts per second = másodpercenkénti beütésszám)

Az 5.1. táblázat összefoglalja valamennyi mérési eredményemet. A táblázat tartalmazza a mérés sorszámát, a mérés paramétereit: a mérőcső átmérőjét (d); az aeroszol áramlási sebességét a mérőcsőben (u); a mérőcső hosszát (L); ha a cső görbe, a görbülés szögét (Θ); ha a cső nem vízszintes, akkor a vízszintessel bezárt szögét (α); valamint a kiülepedés mértékét (azaz a mérőcsőben mért aktivitás osztva

5.1. TÁBLÁZAT

Sor- szám	d (cm)	u (cm/sec)	L (cm)	θ°	α°	$\vartheta_{\text{mért}} \%$	$\vartheta_{\text{számolt}} \%$	
1.	0,1	10	29,0			0,5*	98,6	
2.	0,1	106	31,5			7,1	54,0	
3.	0,1	106	30,3			10,4	52,3	
4.	0,2	65	29,9			49,1	45,1	
5.	0,2	65	45,0			10,6	59,5	
6.	0,2	354	35,6			13,3	11,7	
7.	0,4	120	36,1			19,9	17,1	
8.	0,4	125	36,0			14,5	16,4	
9.	0,4	130	36,1			9,6	15,9	
10.	0,4	130	44,9			18,9	19,4	
11.	0,58	160	48,7			13,5	12,2	
12.	0,6	150	35,9			5,2	9,4	
13.	0,6	236	35,0			1,7*	5,9	
14.	0,8	180	45,4			7,0	7,5	
15.	0,8	276	35,0			0,5*	3,8	
16.	1,0	156	35,1			1,5	5,4	
17.	1,0	156	40,0			6,4	6,2	
18.	1,0	156	41,0			6,7	6,3	
19.	1,0	160	44,3			7,7	6,6	
20.	1,37	150	43,8			17,5*	5,1	
21.	1,4	90	55,1			4,7	10,2	
22.	1,4	180	55,0			2,8	5,2	
23.	1,4	270	55,0			3,5	3,5	
24.	0,2	65	44,8		49,17	9,2	44,4	(59,4)
25.	0,4	130	45,4		25,0	18,0	17,9	(19,6)
26.	0,58	150	44,6		25,0	7,8	10,9	(11,9)
27.	0,8	180	44,8		50,0	4,2	4,8	(7,4)
28.	1,0	160	43,9		50,5	3,7	4,2	(6,6)
29.	1,37	150	44,5		46,7	14,2*	3,6	(5,2)
30.	0,2	65	44,7	90		9,1	72,3	(13,0 + 59,3)
31.	0,4	130	44,8	68		29,6	29,3	(9,9 + 19,4)
32.	0,58	150	46,3	90		22,2	22,7	(10,4 + 12,3)
33.	0,8	180	44,8	120		2,9*	19,4	(12,0 + 7,4)
34.	1,0	531	50,0	90		23,4	23,5	(21,2 + 2,3)
35.	1,37	150	44,0	60		94,2*	8,1	(2,9 + 5,2)
36.	0,26	100	51,7			30,4	40,3	
37.	0,26	100	50,2			31,6	39,3	
38.	0,26	100	51,1			32,2	39,9	
39.	0,26	100	50,7			31,3	39,6	
40.	0,26	100	51,2			31,2	39,9	
41.	0,26	100	52,0	90		40,8	55,8	(15,4 + 40,4)
42.	1,44	150	50,5			2,8	5,6	
43.	1,44	150	50,5			2,8	5,6	
44.	1,44	150	51,0			3,7	5,7	
45.	1,44	150	51,2			3,5	5,7	
46.	1,44	150	51,4			3,1	5,7	
47.	1,44	150	46,5	90		5,2	9,4	(4,2 + 5,2)
48.	1,44	150	54,5	90		5,6	10,2	(4,2 + 6,0)

a szűrőben és a mérőcsőben mért együttes aktivitással (Θ)). Az utolsó oszlopban a számolt Θ értékeket tüntettem fel.

Ferde csövek, azaz $\alpha \neq 0^\circ$ esetében $\Theta_{\text{számolt}}$ értéke mellett, zárójelben megjelöltem a számolt kiüledés mértékét vízszintes csőre ugyanazon áramlási paraméterek mellett; a görbült csöveknél az impakcióból (első szám) és a gravitációs ülepedésből (második szám) adódó értékeket külön-külön.

A mérési eredmények értékelése:

Az 1; 13; 15; 20; 29; 33; 35. sorszámú kísérletek eredményei $\Theta_{\text{számolt}}$ -tól való igen nagymértékű eltérések okára a kísérlet alatt vagy után fény derült, azaz ezen kísérletek egyszerűen nem sikerültek. (Ezeket a táblázatban $\Theta_{\text{mért}}$ -nél csillaggal megjelöltem.)

A 36—40 és 42—46 mérések alapján $\Theta_{\text{mért}}$ szórása 2% alatt van.

A 0,1 és 0,2 cm-es csőátmérőre vonatkozó mérések esetében $\Theta_{\text{számolt}}$ sokkal nagyobb $\Theta_{\text{mért}}$ -nél (5—8 szorosa), l. 2, 3, 5, 24, 30 számú méréseket. Ugyan a 4. és 6. mérés eredménye nagyon jónak mondható, mégis mivel ezeknél is $\Theta_{\text{mért}} > \Theta_{\text{számolt}}$ (s ez nagyon kevészer fordul elő) és 2, 3, 5, 24, 30 számú méréseknél az eltérés igen nagy; arra következtettünk, hogy kis csőátmérők esetében az áramló levegő magával ragadja a már kiüledett részecskék jelentős részét, azaz kifűjja a csőből a lerakódott részecskéket. Ami azt jelenti, hogy a mérőcső belső falát valamely, a részecskéket a vazelinél erősebben megfogó anyaggal kell bevonni. Nagyobb csőátmérőknél ezen effektus kisebb, s ezért a számolt és mért Θ érték eltérése is kisebb, de a feltevést mindenesetre az is alátámasztja, hogy a mért értékek szinte valamennyi esetben kisebbek a számítottnál.

Ezért újabb méréssorozatot végeztünk, l. 36—48-as számú méréseket, ahol vazelin helyett direkt aeroszol részecskék megkötésére kidolgozott szintetikus ragasztóval vontuk be a mérőcső belső falát. Az eredmény most is az volt, hogy a számolt értékek jóval nagyobbak a mérteknél, de egyrészt már csak 1,3—2,1-szeresük, másrészt amint a ragasztó anyag megszáradt a felületen, szemmel látható volt, hogy az nem borítja egységesen a felületet, hanem „cseppekbe” húzódik össze függetlenül attól, hogy a ragasztót milyen oldószerben oldottuk.

Annak ellenére, hogy a kapott mérési eredmények ezen újabb sorozatban sem mondhatók jóknak, mégis nagyon hasznos információkat kaphatunk belőlük.

1. Mivel 36—40-ig és 42—46. mérések áramlási paraméterei ugyanazok, ezért azok a mérés reprodukálhatóságáról is képet kell, hogy adjanak, s mint az eredmények mutatják, a reprodukálhatóság jónak mondható.

2. 41., 47. és 48. mérések mutatják, hogy az impakciós számítások jók, ugyanis a számolt és mért értékek aránya, mérési hibán belül, egyezik az egyenes csövekre kapott eredményekével (36—40. és 42—46. mérésekével).

A 12, 16, 21, 22 méréseknél nem sikerült kideríteni a számolt és mért értékekben mutatkozó jelentős mértékű eltérés okát, mindenesetre ok lehetett pl. a fal bevonatának hiányossága.

A többi mérés értéke aránylag jól egyezik a számított eredménnyel. Tehát a kiüledés mértéke a harmadik fejezetben leírtak — azaz a vártak — megfelelően változik az áramlás, ill. a rendszer különböző paramétereinek függvényében. Vagyis vízszintes egyenes csöveknél a depozíció mértéke, mérési hibán belül, egyenesen arányos a cső hosszával, valamint fordítottan arányos a csőátmérővel és az áramlás sebességével. A vízszintessel α szöget bezáró csövek esetében a depozíció a várakozásnak megfelelően valóban kisebb. Azonban ahhoz, hogy az elméletileg megjósolt össze-

függések kísérleti igazolásáról beszélhessünk, természetesen több és pontosabb mérésre van szükség, de amint azt a 4. fejezetben már említettem, a kísérleteknek nem is az volt egyelőre a céljuk, hanem csak hogy a megfelelő berendezést és módszert kidolgozzuk.

A Θ szögben görbült csövek esetében megállapítható, hogy ekkor a depozíció nagyobb mint egyenes csöveknél, mégpedig annál inkább, minél nagyobb a görbület szöge és minél kisebb a csőátmérő.

6. ÖSSZEFOGLALÁS

A dolgozatomban kitűzött feladat a légzőrendszerben lejátszódó kiüledési alapfolyamatok számítása és kísérleti úton történő ellenőrzése volt, egyenes, görbült, valamint ferde, körkeresztmetszetű csövekben.

Sikerült a tüdő depozíciót meghatározó három alapvető folyamatra: a gravitációs ülepedésre, az impakcióra és a Brown diffúzióból eredő részecske depozícióra vonatkozó analitikus megoldásokat találnunk; majd ezekre programokat írtunk PDP—11—34 számítógépre (ULEP és IMPA nevű programok monodiszperz, míg a SETL és UUTK nevűek polidiszperz rendszerekre adják meg a kiüledés mértékét az egyes alapfolyamatokra; adott rendszerparaméterek mellett).

A gravitációs hatásból származó depozíció számítására több modellt dolgoztunk ki: 1. feltételeztük, hogy a részecskék ülepedés közben követik a lamináris áramlásra jellemző paraboloid sebességprofilt, 2. feltételeztük, hogy a részecskék sebessége a cső egész keresztmetszetén az áramlási sebességgel egyenlő, 3. mint kiderült igen jó közelítésnek felel meg valamely adott magasságú párhuzamos rétegre vonatkozó összefüggés is, 4. valamint levezettük a vízszintessel α -szöget bezáró — ferde — csövek esetére vonatkozó depozíciós egyenleteket is.

A továbbiakban célszerű lenne kidolgozni a szimultán gravitációs ülepedésből és Brown diffúzióból eredő depozíciót megadó egyenleteket, valamint ezekre számítógépes programokat írni. Ezenkívül számításokat végezni az adott rendszerrel — egyenes, görbült és ferde csövek — bonyolultabb, de a tüdő depozícióban fontos szerepet játszó rendszerekre, pl. az elágazásokra.

A feladat kísérleti része a fenti kiüledési folyamatok meghatározására alkalmas mérési módszer kidolgozása volt. Aránylag hosszas kísérletezgetés után, sikerült a kitűzött célnak megfelelő rendszert összeállítanunk, s azon méréseket végeznünk, amelyek reprodukálhatósága elfogadható. Problémát jelent még a mérőcső belső falának a kiüledett részecskéket 100%-ban odatapasztó ragasztó anyaggal való bevonása.

Fontos kutatási irány lenne — amint azt már a számítások jövőbeni feladatainál is említettem — bonyolultabb rendszerekre különösképpen elágazásokra vonatkozó kiüledési kísérletek végzése.

Ezenkívül megemlítem, hogy a végzett munka egyik igen hasznos mellékterméke, hogy a kidolgozott depozíciós egyenletek használhatók minden olyan esetben, ahol aeroszolk kiüledésével kell számolni, pl. aeroszol mintavevők mérési eredményeinek korrekciójába vételénél.

7. IRODALOM

1. *N. A. Fuchs*: The Mechanics of Aerosols, Pergamon Press, Oxford, London, Edinburgh, New York, Paris, Frankfurt, 1964.
2. IAEA, Technical Reports Series No. 142.
3. *Bálint Péter*: Orvosi élettan, Medicina, Budapest, 1972.
4. *Szentágothai János*: Functional anatomy, Medicina, Bp., 1977.
5. *Miskovits Gusztáv és mások*: Tüdőbetegségek, Tankönyvkiadó, Bp., 1979.
6. Report of ICRP Committee II on Permissible Dose for Internal Radiation ICRP Publ. 2. 1959.
7. Deposition and Retention Models for Internal Dosimetry of Human Respiratory Tract ICRP Task Group on Lung Dynamics Health Phys. 12, 173, 1966.
8. *Vigdorchik, Ye.*, The Retention of Aerosols During Respiration, Liot, Leningrad, Chap. 1. 1948.
9. *Wilson, J., La Mer, V., J.* Ind Hyg. Tox., 30, 265, 1948.
10. *Landahl, H. et al.*, Arch. Ind. Hyg. Occ. Med., 3, 359, 1951.
11. *Landahl, H., Black, S., J.* Ind. Hyg. Tox., 29, 269, 1947.
12. *Davies, C. N.*, Proc. Roy. Soc., 133 B, 282, 1946.
13. *Gutmann, M.*, Die Pollenallergie, München. 1929.
14. *Dautrebande, C.*, Physiol. Rev., 32, 214, 1952.
15. *Buckland, F. et al.*, Nature, Lond., 166, 354, 1950.
16. *Shoshkes, M. et al.*, Arch. Ind. Hyg. Occ. Med., 1, 20, 1950.
17. *Van Wijk, A., Patterson, H., J.* Ind. Hyg. Tox., 22, 31, 1940.
18. *Brown, J., Hatch, T.*, Amer. J. Publ. Health, 40 A, 450, 1950.
19. *Davies, C. N.*, Brit. J. Ind. Med., 9, 120, 1952.
20. *Lifshits, I., Lykhina, Ye., Erenburg, G.*, Gig. i sanit. No. 10, 17, 1948.
21. *Findeisen, W.*, Arch. Gesant. Physiol., 236, 367, 1935.
22. *Landahl, H.*, Bull. Mathem. Biophys., 12, 43, 1950.
23. *T. T. Mercer*: Aerosol Technology in Hazard Evaluation, AP. New York and London. 1973.
24. *Fehér István*: A belső sugárterhelés meghatározása állatkísérletben és emberben, Kandidátusi értekezés, Budapest, MTA, KFKI, 1976.
25. *Szende, G., Udvarhelyi K.*, Int. Journ. of Appl. Radiation and Isotopes 26, 53, 1975.
26. *Budó Ágoston*: Mechanika, Tankönyvkiadó, Budapest. 1979.
27. Solutions to the Fokker — Planck equations governing simultaneous diffusion and gravitational settling of aerosol particles from a stationary gas in a horizontal circular tube. Journal of Aerosol Science, 9/3; 209—218, 1978.
28. Simultaneous diffusion and sedimentation of aerosol particles from poiseuille flow in a circular tube, Journal of Aerosol Science, 9/1, 17—23, 1978.
29. *J. W. Thomas*, Particle Loss in Sampling Conduits, in Assessment of Airborne Radioactivity, IAEA, Vienna, 1967.
30. *P. G. Gormley and M. Kennedy*, Diffusion from a Stream Flowing through a Cylindrical Tube, Proc. Roy. Irish Acad., A52: 163—169, 1949.
31. *S. Twomey*, Ball Observatoire du Puy de Dome, p. 173, 1963, cited by *K. Spurny and J. Pich*, Zur Frage der Filtrationsmechanismen bei Membranfiltern, Staub, 24: 250, 1964.
32. *Davies, C. N.*, Proc. R. Soc. B. 133, 298, 1946.
33. Diffusion of aerosols in laminar flow in a cylindrical tube, Journal of Aerosol Science, 2/2, 107—115, 1971.
34. *J. G. Townsend*, "The diffusion of ions into gases", Trans. of the Royal Soc. 193—4, 129—158, 1900.
35. *W. C. DeMarcus, J. W. Thomas*, "Theory of a Diffusion Battery", ORNL—1413 (October 16, 1952).
36. *R. F. Hounam, A. Black and M. Walsh*, The deposition of aerosol particles in the nasopharyngeal region of the human respiratory tract, Aerosol Science, Vol. 2, 47—61, 1971.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Köszönetet mondok témavezetőmnek, dr. Fehér Istvánnak, a KFKI—AEKI Sugárvédelmi Főosztály főosztályvezetőjének segítségéért, mellyel a munkámat irányította.

Köszönettel tartozom a Sugárvédelmi Főosztály azon dolgozóinak, akik konkrét segítségével,

részfeladatok elvégzésével, illetve konzultációikkal hozzájárultak munkám elvégzéséhez. *Bíró János*-nak és *Lancsárics Györgynek* a kísérleti berendezés összeállításánál és a nyomjelzésnél nyújtott segítségükért, valamint *Krebsz Istvánnak* a részecskeméret eloszlás meghatározásáért.

9. FÜGGELÉK

Az elkészített számítógépes programok leírása

A FORTAN nyelvű programok a 3. fejezetben szereplő összefüggések alapján számolják ki a depozíció mértékét (Θ -t).

A gravitációs ülepedésből (Θ_{gr1} és Θ_{gr2} — 1. 3.1. fejezet) és a Brown diffúzióból (Θ_{Br} — 1. 3. 3. fejezet) származó depozíciót az ULEP és SETL nevű, míg az impakcióból (Θ_{imp} — 1. 3. 2. fejezet) származó depozíciót az IMPA és UUTK nevű programok számolják.

Az ULEP és IMPA monodiszperz, míg a SETL és UUTK programok polidiszperz rendszerek-re adják meg Θ -t.

ULEP:

INPUT paraméterek	Formátum	A paraméterek jelentése
NI, NJ, NK, NL	4I5	... db (csőhossz, csőátmérő, áramlási sebesség, részecskeméret) adat. $NI \leq 50$, míg a többi ≤ 10 kell, hogy legyen.
IA	4I5	ha értéke 0: Θ_{gr} -ot számol 1: Θ_{Br} -t számol 2: $\Theta_{gr1} + \Theta_{Br}$ -t számol
IC	4I5	csak akkor kell megadni, ha $IA=0$; jelentése, ha értéke: 0: Θ_{gr1} -et számol 1: Θ_{gr2} -t számol 2: Θ_{gr1} és Θ_{gr2} -t, valamint $\Theta_{gr2} - \Theta_{gr1}$ -et számol
DP(L), L=1, NL	10F10,3	NL db részecskeméret (μm)
D(J), J=1, NJ	10F10,3	NJ db csőátmérő (cm)
U(K), K=1, NK	10F10,3	NK db áramlási sebesség ($cm \cdot sec^{-1}$)
BL(I), I=1, NI	10F10,3	NI db csőhossz (cm)
IB	4I5	csak akkor kell megadni, ha $IA=0$ vagy 2; jelentése, ha értéke: 0: a DP(L); L=1, NL részecskeméretekhöz tartozó határsebességeket — 1. később — meg kell adni, a program ezekkel számol 1: a határsebességeket itt is meg kell adni, s a program azokkal számol tovább, de a Stokes törvény alapján határsebességeket is számol. 2: a határsebességeket nem kell megadni, mert azokat a Stokes törvényből számolja
PP	5F20,15	a részecskék sűrűsége ($g \cdot cm^{-3}$) (csak akkor kell megadni, ha $IB=1$ vagy 2)
TK(L), L=1, NL	5F20,15	Cunningham korrekciós faktorok (csak akkor kell megadni, ha $IB=1$ vagy 2)
VS(L), L=1, NL	5F20,15	a határsebességek ($cm \cdot sec^{-1}$) (csak akkor kell megadni, ha $IB=0$ vagy 1)

INPUT paraméterek	Formátum	A paraméterek jelentése
SETL:		
NI, NJ, NK, NL	415	... darab (csőhossz, csőátmérő, áramlási sebesség, részecskeméret) adat. $NI \leq 50$; NJ és $NK \leq 20$ és $NL \leq 30$ kell hogy legyen,
IA	415	ha értéke: 0: Θ_{gr} -ot számol 1: Θ_{Br} -t számol 2: $\Theta_{gr} + \Theta_{Br}$ -t számol 3: a program úgy fut, hogy először felveszi az $IA=0$, majd az 1 és végül a 2 értékeket $IC=2$ mellett. 4: ugyanígy, de $IC=0$ mellett >4: minden variáción végigfut, azaz $IA=0, 1, 2$ és $IC=0, 1, 2$ értékeken fut végig. 9: annyiban tér el az egyéb >4 esetektől, hogy ha a $\Theta_{gr} (\leq 100\%)$ és $\Theta_{Br} (\leq 100\%)$ összege >100%, akkor ezen összeget írja ki és nem 100%-ot. jelentése, mint az ULEP-ben NL db részecskeméret (μm) a k_i súlyfaktorok ($i=1, NL$) jelentését l. az 5. fejezetben
IC	415	NJ db csőátmérő (cm)
DP(L), L=1, NL	10F10,3	NK db áramlási sebesség ($cm \cdot sec^{-1}$)
SUL(L), L=1, NL	10F10,3	NI db csőhossz (cm)
D(J), J=1, NJ	10F10,3	jelentése, mint az ULEP-ben
U(K), K=1, NK	10F10,3	csak akkor kell megadni, ha $IA=0$ vagy 2;
BL(I), I=1, NI	415	jelentése:
IB	415	ha értéke
ID	415	0: a cső vízszintes 1: a cső nem vízszintes
AL	5F20,15	csak akkor kell megadni, ha $ID=1$; jelentése: a csőnek a vízszintessel bezárt szöge fokokban
PP	5F20,15	jelentése, mint az ULEP-ben
TK(L), L=1, NL	5F20,15	jelentése, mint az ULEP-ben
VS(L), L=1, NL	5F20,15	jelentése, mint az ULEP-ben

IMPA:

NT, NJ, NK, NL	415	... darab (csőgörbület szöge fokban, csőátmérő, áramlási sebesség, részecskeméret) adat $NT \leq 50$; NJ, NK és $NL \leq 20$ kell, hogy legyen
DPAR(L), L=1, NL	10F10,2	NL db részecskeméret (μm)
DCSO(J), J=1, NJ	10F10,2	NJ db csőátmérő (cm)
U(K), K=1, NK	10F10,2	NK db áramlási sebesség ($cm \cdot sec^{-1}$)
TETA(I), I=1, NI	10F10,2	NT db cső görbületi szöge (fok)
CONN(L), L=1, NL	10F10,2	a Cunningham korrekciós faktorok
PP	10F10,2	a részecskék sűrűsége ($g \cdot cm^{-3}$)

UTK:

NT, NJ, NK, NL	415	jelentése, mint az IMPA-ban, azonban itt $NL \leq 30$.
DPAR(L), L=1, NL	10F10,2	NL db részecskeméret (μm)
SUL(L), L=1, NL	10F10,2	a k_i súlyfaktorok ($i=1, NL$) jelentését lásd az 5. fejezetben
DCSO(J), J=1, NJ	10F10,2	NJ db csőátmérő (cm)
U(K), K=1, NK	10F10,2	NK db áramlási sebesség ($cm \cdot sec^{-1}$)
TETA(I), I=1, NT	10F10,2	NT db cső görbületi szög (fok)
CONN(L), L=1, NL	5F 20,15	A Cunningham korrekciós faktorok
PP	10F10,2	a részecskék sűrűsége ($g \cdot cm^{-3}$)

A programok nemcsak a 3.3. fejezetben leírt Θ_{Br2} összefüggés alapján számolnak Brown diffúzióból származó depozíciót, hanem az irodalomban talált egyéb — összesen 5 féle — összefüggések alapján is. A 3.3. fejezetben említettem, hogy ezek közül néhány, csak bizonyos Θ_{Br} érték felett, ill. alatt érvényes. Θ_{Br2} azonban az egész $[0, 1]$ tartományban érvényes, ezért a további négy összefüggésről itt nem írok. A sornymutatón az öt Θ_{Br} érték egymás mellett jelenik meg, s Θ_{Br2} -nek az 5., azaz a jobb szélső adat felel meg.

A további output paraméterek jelentését a sornymutató kiírja.

TRANSPORTFOLYAMATOK IRREVERZÍBILIS TERMODINAMIKAI ELMÉLETE ÉS ALKALMAZÁSA A SZUPRAVEZETŐK VIZSGÁLATÁBAN*

MARTINÁS KATALIN

ELTE, Alacsony Hőmérséklet Fizikai Tanszék

TARTALOMJEGYZÉK

Bevezetés	182
I. <i>A konstruktív termodinamika axiómarendszerének teljessé tétele</i>	183
1.0. Bevezetés	183
1.1. A konstruktív termodinamika alapfogalmai	184
1.1.1. Termodinamikai rendszer	184
1.1.2. Termodinamikai paraméterek	185
1.2. A konstruktív termodinamika axiómái	185
1.2.1. A Callen-féle axiómarendszer	185
1.2.2. A Callen-féle axiómarendszer által definiált „entrópiák” meghatározása	186
1.2.3. A Callen-féle axiómarendszer teljessé tétele	189
1.2.4. Az általánosított Callen-féle axiómarendszer	190
1.2.5. A Callen-féle axiómarendszer kiterjesztése speciális rendszerekre	191
1.3. Az egyensúlyi termodinamika extrémum elvei	193
1.4. Transzportfolyamatok termodinamikai tárgyalása	193
1.4.1. Minimális entrópiaprodukció elve	194
1.4.2. Minimális P-produkció elve	194
II. <i>A termodinamikai transzportelmélet alkalmazása a szupravezető állapot vizsgálatában</i>	196
2.0. Bevezetés	196
2.1. Irodalmi áttekintés	197
2.1.1. A szupravezetés alapelméletei	197
2.1.2. A szupravezetők termodinamikai vizsgálatára vonatkozó irodalmi eredmények összefoglalása	199
2.2. A szupravezető állapot	201
2.2.1. A szupravezető állapot jellemzése	201
2.2.2. A szupravezető állapot jellemző paraméterei	203
2.2.3. A hőmérséklet hatása	204
2.2.4. A mágneses tér hatása	204
2.2.5. A II. típusú szupravezetők leírása	206
2.2.6. A kvalitatív leírás eredményeinek összehasonlítása a mikroszkopikus számítások eredményeivel	207
2.3. A szupravezető állapot termodinamikai leírása	208
2.3.1. A belső energia meghatározása	208
2.3.2. Fázisátalakulások	212
2.3.3. Stabilitás	213
2.3.4. Összehasonlítás az irodalommal	214
2.4. A szupravezetőkben lejátszódó transzport folyamatok termodinamikai leírása	215
2.4.1. Branch imbalance relaxáció	215

* Érkezett 1983. január. 27. Kandidátusi disszertáció. Megvédve 1982. április 2.

2.4.2. Ideális flux-flow	215
2.4.3. Nem ideális flux-flow	217
2.4.4. Flux-flow kis GL-paraméterű szupravezetőkben	218
III. Kritikus állapot	219
3.1. Egyedi pinning típusok és pinning erő számítások	220
3.1.1. Vortex-törzs — pinning centrum kölcsönhatás	220
3.1.2. Mágneses kölcsönhatás	221
3.1.3. Rugalmas kölcsönhatás	221
3.1.4. Becslések a GL elmélet alapján	222
3.2. Az effektív pinning erő meghatározása (irodalmi áttekintés)	222
3.3. Az effektív pinning erő	225
3.4. Összehasonlítás a kísérleti eredményekkel	226
3.4.1. Az effektív pinningsűrűség	226
3.4.2. Összehasonlítás a kísérleti eredményekkel	228
IV. Összefoglalás	228
Fontosabb jelölések	230
Köszönetnyilvánítás	231
Irodalomjegyzék	231

BEVEZETÉS

Dolgozatunk célja a szupravezetőkben lejátszódó transzport folyamatok vizsgálata az irreverzibilis termodinamika elveinek felhasználásával. A témaválasztást az indokolja, hogy az elmúlt több mint fél évszázad során a szupravezető jelenségek kutatásában számos kiemelkedő elmélet született (BCS [1] és GLAG [2] elmélet), és a jelenség csoportról nagyszámú elméleti és kísérleti információt nyertek, azonban a reális szupravezető rendszerek leírásában számos nyitott kérdés maradt.

A témaválasztást indokolja az is, hogy különösen a II. típusú szupravezetők felfedezése és műszaki alkalmazásuk megkezdése óta [3] a szupravezetők fokozatosan behatolnak a műszaki fejlesztés különböző területeire (szupravezető elektronika, szupravezető kábelek, nagy mágnesek, szupravezető forgógépek stb.).

Dolgozatunk első fejezetében összefoglaljuk a vizsgálataink során alkalmazott konstruktív, makroszkopikus fizikai megközelítésen alapuló termodinamika alapfogalmain és a Callen által javasolt axióma-rendszert [4], amely nem biztosítja az egyértelmű entrópia definiálást. Mi megadjuk azt a szükséges és elegendő, a makroszkopikus fizikai megközelítés szelleméhez illeszkedő kiegészítést, amellyel a posztulátum rendszer már egyértelműen definiálja az entrópiát.

A második fejezetben először a szupravezető állapot jellemző tulajdonságait ismertetjük az általunk kidolgozott leírás keretein belül, majd az I. fejezetben ismertetett termodinamikai apparátussal megadjuk a szupravezető állapot és a szupravezetőkben lezajló folyamatok konzekvens termodinamikai leírását.

A 3. fejezetben a disszipatív vortex áramlás megjelenésének feltételével, a kritikus állapottal foglalkozunk, a termodinamikai vizsgálataink során nyert kritikus állapot egyenlet felhasználásával a pinnerörök összegzésére egy új eljárást dolgozunk ki, amely mentes az irodalomban található modellek ellentmondásaitól és jól illeszkedik a mérési eredményekhez.

Az elért eredményeink lényegét az alábbiakban röviden összefoglaljuk:

1. Első feladatként megvizsgáltuk azt, hogy a Callen-féle posztulátum-rendszer teljessé tételéhez (az egyértelmű entrópia definiáláshoz) milyen posztulátumnak kell azt kiegészíteni. Megmutattuk, hogy az $1/T$ zérus pontjának rögzítése szükséges és elegendő kiegészítés. Ez jobban illeszkedik a Callen-féle posztulátum-rendszerhez, mint a Guggenheim által javasolt kiegészítés [5], amely felhasználja a kvázisztatikus adiabatikus folyamat fogalmát, s ezzel megkérdőjelezi a makroszkopikus fizikai megközelítés létjogosultságát. Bevezettük az általánosított Callen-féle posztulátum-rendszert, amelyben az „entrópia” (P potenciál függvény) létezését csak a vizsgált rendszerre követeljük meg, így leszarmasztattunk egy transzformációs szabályt, amely teljesülése esetén a rendszer stacionárius állapota minimális P -produkcióval jellemezhető, ezzel kiterjesztettük azon rendszerek körét, amelyek

stacionárius állapota extrémum elvvel jellemezhető. Kiterjesztettük a Callen-féle posztulátum rendszert speciális rendszerekre, azaz a felülről korlátos energia sűrűségű rendszerekre.

2. A szupravezető állapot leírására kidolgoztunk egy modellt, amelyben felhasználjuk a határozatlansági relációt, a termodinamika elveit és az elektrodinamikai alapegyenleteket, valamint az alábbi kísérleti tényeket:

1. Végtelen vezetőképeség;

2. a szupravezetők egy csoportja esetén $H > H_c$ külső tér esetén a minta tökéletes diamágnes;

3. a szupravezető-átmenet során változás csak az elektronállapotban van első rendben.

A felsorolt kísérleti eredmények felhasználásával kvalitatíven, azaz kvantummechanikából csak a határozatlansági relációt felhasználva leszámaztatjuk a hőmérsékletfüggő konferenciahosszat, a kritikus hőmérsékletet, a kritikus mágneses tereket, az I. és II. típusú szupravezetők közötti különbséget, és azt, hogy a II. típusú szupravezetőkben $H_{c1} < H < H_{c2}$ külső mágneses térben a mágneses tér behatolása fluxus fonalak alakjában történik, amelyek Φ_0 elemi fluxussal rendelkeznek, és háromszög rácsot alkotnak.

3. Kidolgoztuk a szupravezetők termodinamikai leírását.

Meghatároztuk a szupravezető belső energiájának a normál állapotot leíró termodinamikai paramétereken kívül még szupravezető elektronszámot (N_s), illetve a vortex számot (N_v) és a hozzájuk tartozó intenzív paramétereket a kötési energia (E_k) és a vortex potenciál, (U_v) valamint a vortex-rács deformációs tenzort (σ_{ik}) és feszültség tenzort (ϵ_{ik}) kell bevezetni. Ez a belső energia a szupravezető rendszerről minden információt tartalmaz. Leírja a fázisátalakulásukat, és a termodinamikai stabilitási kritériumok felhasználásával megszorításokat nyerhetünk a fenti paraméterek hőmérséklet függésére.

4. Modellt dolgoztunk ki a kis Ginzburg—Landau paraméterrel rendelkező szupravezetők nem lineáris $U—I$ karakterisztikájának leírására. A gyenge vortex-vortex kölcsönhatás következményeként feltettük, hogy a különböző pinnerövel rögzített vortexek nem egyszerre kerülnek kritikus állapotba. Figyelembe véve a Lorentz-erőt, a pinnerőt és a vortex-vortex kölcsönhatásból származó erőket, meghatároztuk a kritikus áramokat, illetőleg az $U—I$ karakterisztikát. Modelünk jól leírja a kísérleti eredményeket.

5. Megmutattuk, hogy a kritikus állapotnak az irodalomban elterjedten használt egyenlete közelítő jellegű, mivel nem veszi figyelembe, hogy a vortexek nem csak mágneses fluxusok, hanem egy szabályos rácsot is alkotnak, ezért a rács deformációja is erőhatásként jelentkezik. Rugalmas fluxusrács közelítésben meghatároztuk a rácsdeformációból származó erőhatást.

6. A II. típusú szupravezetők kutatásának egyik alapproblémája a pinneröök összegezése. Mivel az egyedi pinner centrumok kötőerejét ki lehet számítani, egy jól működő összegzési modell felhasználásával meg lehet jósolni a minta kritikus áramát. (Ennek többek között szupravezető gyártási jelentősége is van.)

Az irodalomban található összegezési modellek a vortexpinner kölcsönhatási potenciál létezéséből indulnak ki, s egy olyan küszöbérték kritériumra vezetnek, amely ellentmond a kísérleti eredményeknek, és a kapott görbe nem írja le a kísérletileg meghatározott egyedi pinnerő effektív pinnerő kapcsolatát.

Összegezési eljárásunkban feltételeztük, hogy a pinnervortex kölcsönhatás nyugalmi súrlódási típusú erővel írható le.

Eredményünk, a kísérleti tényekkel összhangban, azt mutatta, hogy nincs küszöbérték, és az elméletileg számított görbe a hibahatáron belül jól illeszkedik a mért eredményekhez.

I. A KONSTRUKTÍV TERMODINAMIKA AXIÓMARENDSZERÉNEK TELJESSÉ TÉTELE

1.0 Bevezetés

A jelenlegi egyensúlyi termodinamikában háromféle felépítés terjedt el:

- A klasszikus vagy ciklusokon alapuló megfogalmazás (*S. Carnot* [6], *R. Clausius* [7]).
- A potenciálfüggvényeken alapuló kémiai termodinamika (*J. W. Gibbs* [8]).
- Konstruktív termodinamika, amely a termodinamikai rendszerek fundamentális tulajdonságait leíró axiómákból indul ki. Ezen belül két fő csoport különböztethető meg:

- Carathéodory-féle felépítés, amelyet *C. Carathéodory* [9] és *T. Ehrenfest-Afanassjewa* [10] fejlesztett ki. A Carathéodory-féle megközelítés továbbfejlesztésével nagyon sokan foglalkoztak, itt csak néhányat említünk meg. (*M. Born* [11], *A. Lande* [12], *P. T. Landsberg* [13]; és ebbe a csoportba tartozik a Gyarmati-féle genetikai axiómatika [14].
- „Makroszkopikus fizikai” megközelítés: *I. Fényes* [15,16], *H. B. Callen* [4], *L. Tisza* [17], *I. Kirschner* [18, 19], *K. Martinás* [20, 21].

Dolgozatunkban a termodinamikai rendszerek tulajdonságaiból kiinduló konstruktív axiómatikát használjuk.

A jelenlegi nemegyensúlyi termodinamikai vizsgálatok alapvetően két csoportra oszthatók, a lokális egyensúlyi hipotézist felhasználó és a lokális egyensúlyi hipotézist elvető termodinamikai konstrukciókra.

- a) A lokális egyensúlyi hipotézisen alapuló nemegyensúlyi termodinamikai irányzatok:

A nemegyensúlyi termodinamika alapjait *L. Onsager* [22] rakta le. A stacionárius állapotra vonatkozó legfontosabb elvek: Gyarmati-féle governing principle [*I. Gyarmati* [14, 23, 24, 25]. Univerzális evolúciós kritérium (*I. Prigogine* 1945 [26]).

- b) A lokális egyensúlyi hipotézist elvető nemegyensúlyi termodinamikában a rendszer állapotát az extenzív sűrűségek önmagukban már nem határozzák meg. A makroszkopikus dinamikus elmélet alapfeltevése az, hogy egy b test állapotát $t > t_0$ időpontban teljes mértékben meghatározza a környezettel történő kölcsönhatás a $t > t_0$ időszakban, és a rendszer állapota a $-\infty < t \leq t_0$ időszakban, azaz a rendszer történelmére is figyelembe kell venni. Az egyes irányzatok a II. főtételeknek megfelelő posztulátum megfogalmazásában különböznek egymástól. A legfontosabb irányzatok:

- *Coleman, Noll, Gurtin et al.* (lásd például [27]), feltették, hogy a rendszer állapotát leíró konstitutív funkcionálokon kívül a termodinamikai leíráshoz még további két konstitutív funkcionál szükséges, egy az abszolút hőmérsékletre (T) és egy a fajlagos entrópiára (s).
- *S. Nemat-Nasser* [28] a hőmérséklet és az entrópia létezését a Carathéodory-féle elérhetetlenségi posztulátumhoz hasonló posztulátumból származtatja le.
- *J. Meixner* nem tételezi fel a nem-egyensúlyi entrópia létezését [29], feltételezi azonban a hőmérséklet létezését.

1.1. A konstruktív termodinamika alapfogalmai

1.1.1. Termodinamikai rendszer

Definíció: Termodinamikai rendszernek nevezzük azokat a rendszereket, amelyekre teljesül az, hogy létezik olyan téridő tartomány, amelyre átlagolva a rendszer lényeges (méréndő) paramétereit, az átlagérték nem függ az átlagolás módjától, hanem a rendszerre jellemző.

A definícióból következik, hogy a termodinamikai rendszer fogalom, csak a rendszer-mérés viszonylatában létezik. Azt, hogy egy rendszer termodinamikai rendszerként tárgyalható vagy sem, nem önmagukban a rendszer tulajdonságai határozzák meg, hanem az is, hogy mit és hogyan kérdezzük a rendszerről.

A termodinamikai leírás során meghatározzuk a rendszerünk azon kölcsönhatásait, amelyeket vizsgálni akarunk, s a termodinamikai modellrendszer csak ezeket a kölcsönhatásokat tartalmazza, azaz a reális termodinamikai rendszer helyett közelítő termodinamikai rendszert használunk.

A közelítő termodinamikai rendszer használata (a továbbiakban termodinamikai rendszernek nevezzük) a modell és a reális rendszer közötti megfelelést téridőben korlátozza.

Az alsó korlát a tér-időbeli átlagolásból származik, a felső korlátot az jelenti, hogy figyelembe nem vett kölcsönhatások következtében a rendszer időben fejlődik.

1.1.2. Termodinamikai paraméterek

Termodinamikai (makroszkopikus) paraméterek szükségszerűen olyan fizikai mennyiségek, amelyek a téridőbeli átlagolás „eredményei”. A megmaradó fizikai mennyiségekre igaz, hogy mérlegegyenlet írható fel rájuk, additívak, arányosak a rendszer méreteivel. Ebből kiindulva bevezetjük az extenzív paraméter fogalmát.

Extenzív paramétereknek nevezzük azokat a termodinamikai rendszerek leírására használt mennyiségeket, amelyekre teljesül, hogy a rendszer kiterjedésével arányosak, additívak, mérlegegyenlet írható fel rájuk, a független extenzív paraméterek száma megegyezik a rendszer lehetséges kölcsönhatásainak számával. A mérlegegyenletek általános alakja:

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{J}_i = \sigma_i, \quad (1.1)$$

ahol

- q_i — az i -edik extenzív sűrűsége;
- \mathbf{J}_i — az i -dik extenzív áram sűrűsége;
- σ_i — az i -dik extenzív forrás sűrűsége.

Az áramra és a forrásra való felbontást a határfelületen történő viselkedés határozza meg.

1.2. A konstruktív termodinamika axiómái

1.2.1. Callen-féle axiómarendszer

Callen 1960-ban javasolt egy termodinamikai axiómarendszert [4], amely csak makroszkopikus tulajdonságokat tartalmaz, és nem használ olyan nehezen értelmezhető fogalmakat, mint a kvázisztatikus adiabatikus folyamat, reverzibilis folyamat stb., amelyek egyébként a valóságban nem is léteznek.

A Callen-féle axiómarendszer posztulátumai:

I. posztulátum:

A termodinamikai rendszer állapotát az extenzív paraméterek egyértelműen meghatározzák.

II. posztulátum:

Tetszőleges összetett rendszer esetén létezik az extenzív paraméterek egy olyan függvénye, amely minden egyensúlyi állapotban értelmezhető és a következő tulajdonságokkal rendelkezik:

Zárt rendszerben belső megszorítások nélkül az extenzív paraméterek olyan értéket vesznek fel, amelyek az S entrópia függvényét maximalizálják a belső megszorítások mellett fellépő egyensúlyi állapotokban elérhető entrópia értékekhez képest.

III. posztulátum:

Az összetett rendszer entrópiája a részrendszerek entrópiájának összegeként nyerhető, additív. Az entrópia folytonos, differenciálható és szigorúan monoton növekvő függvénye a belső energiának.

IV. posztulátum:

A rendszer entrópiája eltűnik olyan állapotban, amelyben

$$\frac{\partial E}{\partial S} \rightarrow 0. \quad (1.2)$$

Guggenheim [5] megmutatta, hogy a Callen posztulátum rendszer nem definiálja egyértelműen az entrópiát, s az egyértelmű entrópia definiálás biztosítására az alábbi kiegészítést javasolta: „Kvázisztatikus adiabatikus folyamatban az entrópia nem változik”.

Ez egy Carathéodory-féle axióma, amelynek használatával megszűnik a Callen posztulátum rendszer leglényegesebb előnye, a nehezen értelmezhető klasszikus termodinamikai fogalmak kiküszöbölése.

Ez a kiegészítés azt indikálja, hogy nem lehet makroszkopikus fizikai megközelítéssel felépíteni a termodinamikát.

1.2.2. A Callen posztulátum-rendszer által definiált „entrópiák” meghatározása

A Callen posztulátumok kimondják, hogy létezik egy, a posztulátumokkal rögzített tulajdonságokkal rendelkező entrópiafüggvény. Ebben a fejezetben azt vizsgáljuk meg, hogy a rögzített tulajdonságokkal milyen függvényhalmaz rendelkezik.

A vizsgálat során feltételezzük, hogy a függvényhalmaz egy elemét ismerjük, ezt entrópiának nevezzük (S), és meghatározzuk azt a transzformációs szabványt, amelylyel a posztulátumokat kielégítő függvények halmazának többi elemét (Q , ekaentrópia) az entrópiából elő lehet állítani.

Az I–III. posztulátumból következik, hogy egy egyensúlyi rendszer Q függvénye az extenzív paraméterek homogén elsőrendű függvénye, azaz

$$Q = Q(x_1, x_2, \dots, x_{n+1}) = \frac{1}{\lambda} (\lambda x_1, \lambda x_2, \dots, \lambda x_{n+1}) \quad (1.3)$$

ahol λ konstans. Ennek megfelelően Q a következő alakban írható fel:

$$Q = \sum_{i=1}^{n+1} \Gamma_i X_i \quad (1.4)$$

ahol:

$$\Gamma_i = \frac{\partial Q}{\partial X_i} \quad (1.5)$$

az i -ik intenzív paraméter. Γ_i nem szükségszerűen azonos az entropikus intenzív paraméterekkel $\left(Y_i = \frac{\partial S}{\partial X_i}\right)$, kapcsolatukat a későbbiekben megvizsgáljuk.) Ebben a esetben is teljesül a Gibbs—Duhem reláció,

$$\sum_{i=1}^{n+1} X_i \delta \Gamma_i = 0. \quad (1.6)$$

A II. posztulátum előírja, hogy zárt egyensúlyi rendszerben minden változás Q értékét csökkenti. Legyen A egy egyensúlyi rendszer, amelyet két részre bontunk (A_1, A_2). Az A_1 és A_2 egyensúlyi rendszerek, és egymással is egyensúlyban vannak. A két rendszer között nincs fal. Az alrendszerek extenzív paraméterei:

$$X_1^1, X_2^1, \dots, X_{n+1}^1,$$

illetve

$$X_1^2, X_2^2, \dots, X_{n+1}^2,$$

valamint

$$X_i = X_i^1 + X_i^2.$$

A rendszer egyensúlyi állapotát a következő módon zavarjuk meg:

$$X_i^1 = X_{i0}^1 + \delta X_i;$$

$$X_i^2 = X_{i0}^2 - \delta X_i.$$

Q értékének változása

$$\begin{aligned} \Delta Q &= Q^1(X_i^1) + Q^2(X_i^2) - Q^1(X_{i0}^1) - Q^2(X_{i0}^2) = \sum_i \left(\frac{\partial Q_1}{\partial X_i^1} - \frac{\partial Q_2}{\partial X_i^2} \right) \delta X_i + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{ik} \left\{ \frac{\partial^2 Q^1}{\partial X_i^1 \partial X_k^1} + \frac{\partial^2 Q^2}{\partial X_i^2 \partial X_k^2} \right\} \delta X_i \delta X_k. \end{aligned} \quad (1.7)$$

A II. posztulátum előírja, hogy

$$\Delta Q < 0, \quad (1.8)$$

azaz

$$\sum_i (\Gamma_i^1 - \Gamma_i^2) \delta X_i - \sum_{ik} (Q_{ik}^1 + Q_{ik}^2) \delta X_i \delta X_k < 0,$$

ahol:

$$Q_{ik} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 Q}{\partial X_i \partial X_k}. \quad (1.9)$$

A stabil egyensúlyi állapot feltétele:

$$\Gamma_i^1 = \Gamma_i^2, \quad (1.10a)$$

az intenzív paraméterek homogenitása, és

$$\det Q_{ik} \equiv 0, \quad (1.10b)$$

a Q_{ik} mátrix pozitív szemidefinitása.

A Q_{ik} mátrix szemidefinitása azt a tényt tükrözi vissza az olyan fluktuációk, amelyek csak az alrendszerek relatív méretét változtatják,

$$\delta X_i = \lambda X_i \quad (1.11)$$

nem befolyásolják az eredeti egyensúlyi állapotot (a teljes rendszer állapotát), ennek megfelelően a teljes Q nem változik.

Annak érdekében, hogy a szemidefinit mátrixok kezeléséből származó nehézségeket kiküszöböljük, bevezetjük a sűrűségeket.

$$q_i = \frac{\partial X_i}{\partial X_{n+1}} \quad (1.12)$$

Q_i az i -dik extenzív paraméter sűrűsége, X_{n+1} = térfogat, és

$$q = \frac{\partial Q}{\partial V} = q\text{-sűrűség.} \quad (1.13)$$

Az intenzív paraméterek:

$$\Gamma_i = \frac{\partial q}{\partial q_i}. \quad (1.14)$$

Az $n+1$ -edik intenzív paramétert a Gibbs—Duhem reláció segítségével határozhatjuk meg.

A q_{ik} sűrűségmátrix pozitív definit

$$q_{ik} = -\frac{\partial^2 q}{\partial q_i \partial q_k} \quad (1.15)$$

A Q a következő alakban írható fel:

$$Q = \sum_i \int \Gamma_i(q_1, \dots, q_n) dq_i + Q_0 = \sum_{ik} \iint q_{ik} dq_i dq_k + \sum_i \int \Gamma_{i0} dq_i + Q_0 \quad (1.16)$$

azaz a Q definiáláshoz meg kell adni a Γ_i intenzív paramétereket az extenzív sűrűségek függvényében

$$\Gamma_i = \Gamma_i(q_1, q_2, \dots, q_n), \quad (1.17)$$

és a Q_0 értékét. Azonban a Γ_i -k nem függetlenek egymástól, mivel

$$\frac{\partial \Gamma_i}{\partial q_k} = \frac{\partial \Gamma_k}{\partial q_i}. \quad (1.18)$$

Az egyensúlyi állapot tulajdonságaiból és az intenzív paraméterek definíciójából következik, hogy Γ_i felírható az entropikus intenzív paraméterek (Y_i) függvényeként:

$$\begin{aligned} \Gamma_i &= \Gamma_i(Y_1, \dots, Y_n); \\ \Gamma_i &= \sum_k \int \Gamma^{ik} dY_k + \Gamma_{i0} \end{aligned} \quad (1.19)$$

ahol:

$$\Gamma^{ik} = \frac{\partial \Gamma_i}{\partial Y_k}. \quad (1.20)$$

A q_{ik} és az s_{ik} mátrix kapcsolata:

$$q_{ik} = -\frac{\partial^2 q}{\partial Q_i \partial Q_k} = \sum_e -\frac{\partial \Gamma_i}{\partial Y_e} \cdot \frac{\partial Y_e}{\partial Q_k} = \sum_e \Gamma^{ie} s_{ek} = q_{ki} \quad (1.21)$$

és

$$Q = \sum_{ik} \iint q_{ik} dQ_i dQ_k + \sum_i \int \Gamma_{i0} dQ_i + Q_0 = \sum_{ek} \iint \Gamma^{ie} s_{ek} dQ_i dQ_k + \sum_i \int \Gamma_{i0} dQ_i + Q_0 \quad (1.22)$$

A Γ^{ik} mátrixra vonatkozó megszorítások:

- a) A definícióból következik, hogy Γ^{ik} nem szinguláris, pozitív definit mátrix.
 b) $\Gamma^{ik} = \Gamma^{ik}$, azaz Γ^{ik} szimmetrikus mátrix mivel az 1.21. összefüggésnek diagonális sík esetén is teljesülnie kell.

$$c) \quad \Gamma^{ik} = f(Y_1, \dots, Y_n) \delta_{ik}, \quad (1.23)$$

mivel a Γ^{ik} mátrix az összes lehetséges termodinamikai rendszer entrópiamátrixával felcserélhető.

$$d) \quad \frac{\partial \Gamma^{ik}}{\partial Y_1} = \frac{\partial \Gamma^{il}}{\partial Y_k} \quad (\text{az 1.18. egyenletből következik}),$$

azaz

$$\Gamma^{ik} = C \delta_{ik}, \quad i = 1, \dots, n. \quad (1.24)$$

A posztulátumokat kielégítő Γ^{ik} mátrix az egység mátrix, mivel az egymástól csak konstans szorzó tényezőben különböző intenzív paramétereket nem tekintjük különbözőnek.

A IV. posztulátum Q_0 értékét rögzíti. Az I—IV. posztulátumok nem definiálják egyértelműen az entrópiát, mivel Γ_{i0} értéke nem rögzített.

1.2.3. A Callen-féle axiómarendszer teljessé tétele

Az előző fejezetben megmutattuk, hogy a Callen posztulátum-rendszer nem rögzíti az entrópiikus intenzív paraméterek zéruspontját. Az $1/\Gamma_i$ és a Γ_i/Γ_i energikus intenzív paraméterek zéruspontját a IV. posztulátum, illetve nem termodinamikai elvek rögzítik, így csak a $\Gamma_i/1(T)$ zérus pontjának rögzítése szükséges. A posztulátum-rendszer szelleméhez illeszkedő kiegészítés [20, 21]:

V. posztulátum:

$$\lim_{E/v \rightarrow \infty} \frac{\partial S}{\partial E} = 0$$

1.2.4. Általánosított Callen-féle axiómarendszer [20]

A termodinamikai vizsgálatok során gyakran találkozunk olyan esettel, amikor csak egyszerű rendszerrel kell dolgozni, a rendszer kölcsönhatását a környezettel erőkkkel és áramokkal vesszük figyelembe. Ebben az esetben az I—V. posztulátumok előírásai közül nem mindent kell kihasználni, a II. és III. posztulátumokban a tetszőleges összetett rendszer helyett egyszerű rendszert lehet használni. Az általam javasolt axiómarendszer az axiómák gyengítése következtében nem definiálja egyértelműen az entrópiát, (ezért a definiált függvényeket P potenciál függvénynek nevezzük), azonban a nem egyértelmű definiálásból következő szabadságot fel lehet használni az adott fizikai problémához jobban illeszkedő leírás kiválasztására. A kiegészített Callen-féle posztulátum-rendszer helyett ezért bevezetünk egy olyan axióma rendszert, amelyben a P potenciálfüggvény létezését csak a vizsgált egyszerű rendszerre követeljük meg. (A továbbiakban: Általánosított Callen-féle posztulátum-rendszer.)

I. posztulátum:

Az egyszerű termodinamikai rendszer állapotát az extenzív paraméterek egyértelműen meghatározzák.

II. posztulátum:

Tetszőleges egyszerű rendszer esetén létezik az extenzív paramétereknek egy olyan P -potenciál függvénye, amely minden egyensúlyi állapotban értelmezhető és a következő tulajdonságokkal rendelkezik: zárt rendszerben belső megszorítások nélkül az extenzív paraméterek olyan értéket vesznek fel, amelyek a P potenciál függvény értékét maximalizálják a belső megszorítások mellett fellépő egyensúlyi állapotokban eltérő P értékekhez képest.

III. posztulátum:

Egy egyszerű rendszer P potenciál függvénye a részrendszerek P függvényeinek összegeként nyerhető, additív. A P függvény folytonos, differenciálható és szigorúan monoton növekvő függvénye az energiának.

IV. posztulátum:

P eltűnik olyan állapotokban, amelyekben

$$\frac{\partial E}{\partial P} = 0. \quad (1.25)$$

V. posztulátum:

$$\lim_{E/V \rightarrow \infty} \frac{\partial P}{\partial E} = 0: \quad (1.26)$$

Az általánosított Callen-féle posztulátumok által meghatározott P potenciál függvények az entrópiától abban különböznek, hogy az 1.21. egyenlet teljesülését csak a vizsgált rendszerre kell megkövetelni, azaz a Γ^{ik} mátrixnak csak a vizsgált rendszer entrópia mátrixával kell felcserélhetőnek lenni. A Γ^{ik} mátrixra vonatkozó megszorítások:

$$\sum_k \Gamma^{ik} s_{kl} = \sum_k \Gamma^{lk} s_{ki}$$

a vizsgált rendszer esetében, és

$$\frac{\partial \Gamma^{ik}}{\partial Y_l} = \frac{\partial \Gamma^{il}}{\partial Y_k} \quad (i, k, l = 1 \dots n).$$

A fenti megszorítások nem definiálják egyértelműen a P potenciálfüggvényt, mivel Γ^{ik} nem szükségszerűen az egység mátrix. A későbbiekben meg fogjuk vizsgálni, hogy az ebből eredő szabadságot hogyan lehet felhasználni a termodinamikai leírás egyszerűsítésére (1.3, 1.5.2. fejezetek).

Az így definiált Γ_i intenzív paraméterek speciális esetben (például hővezetési problémák esetén) ekvivalensek a Gyarmati által bevezetett Fourier-, energia és entrópia képpel [25]. Általános esetben pedig az általánosított Γ -képpel [30].

A Gyarmati képek bevezetésére az nyújt alapot, hogy a hőáramsűrűséget három különböző együtthatóval és erővel írhatjuk fel. Nevezetesen

$$J_q = -\lambda \nabla T = -L_{qq} \nabla \ln T = L_{qq} \nabla 1/T \quad (1.27)$$

ahol az erők az

$$X_q = -\nabla T, \quad X_q = -\nabla \ln T, \quad X_q = \nabla 1/T \quad (1.28)$$

választásnak felelnek meg, azaz a hővezetési probléma tárgyalása esetén a $\Gamma_S = 1/T$, $\Gamma_F = T$, ill. a $\Gamma_E = \ln T$ paraméter választás adja vissza a Gyarmati-féle képeket.

Az erőreprezentáció általános globális alakjának felírása a P potenciál függvényekre

$$\delta \int (\pi - \psi_p) dV = 0; \quad \psi_p = \frac{1}{2} L_p \cdot (\nabla \Gamma_p)^2, \quad (1.29)$$

ahol π a p -produkció és ψ_p a P -disszipációs potenciál visszaadja a Fourier-, energia, ill. az entrópia képekben felírt alakját a Gyarmati-elvnek.

1.2.5. A Callen-féle posztulátum-rendszer kiterjesztése speciális rendszerekre [31]

Az 1.2.1.—1.2.3. fejezetekben ismertetett Callen-féle posztulátum-rendszer nem alkalmazható felülről korlátos energiasűrűségű rendszerekre (speciális rendszerekre). A speciális rendszerek tárgyalásához szükséges definíciók:

Koegzisztáló termodinamikai rendszerek: Egy termodinamikai rendszer koegzisztáló termodinamikai rendszerek összességéként tárgyalható, amikor a termodinamikai rendszer tulajdonságai több csoportra oszthatók, oly módon, hogy az egyes csoportokba tartozó paraméterek értéke független lehet a többi csoportba tartozó paraméterek értékétől. Természetesen ez a felbontás csak az alrendszerek közötti relaxációs időn belül értelmezhető. A koegzisztáló termodinamikai rendszerek létezésének feltétele, hogy

$$\tau_r \gg \tau_{ri},$$

ahol τ_r az alrendszeren belüli folyamatok relaxációs ideje, τ_r az alrendszerek közötti folyamatok relaxációs ideje. τ_r időn belül az alrendszerek független termodinamikai rendszerként tárgyalhatók. Példa lehet az ilyen termodinamikai rendszerekre a LiF kristály magspin rendszere és maga a kristály magspinek nélkül, ekkor $\tau_{ri} \sim 10^{-5} s$, $\tau_r \sim 5$ perc [32]. Speciális termodinamikai rendszer: Felülről korlátos energiasűrűségű termodinamikai rendszer.

A koegzisztáló termodinamikai rendszerek létezése biztosítja azt, hogy a makroszkopikus rendszerek bizonyos részrendszereit speciális termodinamikai rendszerként lehessen tárgyalni.

Az 1.2.4. fejezetben megmutattuk, hogy abban az esetben, amikor csak egy rendszert tárgyalunk önmagában, a Callen-féle posztulátumok megengedik a P -potenciál függvények használatát. Az egyértelmű entrópia definiálásához az összes termodinamikai rendszerrel való kölcsönhatást figyelembe kellett venni, ennek megfelelően ahhoz, hogy a speciális rendszerek esetén egyértelműen definiált entrópiát kapjunk, biztosítani kell a speciális rendszerek és a normál rendszerek kölcsönhatását. Az előzőekben a speciális rendszereket a τ_r időn belül definiáltuk, biztosítani kell, hogy a koegzisztáló termodinamikai rendszerekre történő felbontás a τ_r időn túl is alkalmazható legyen. A fenti definíciók felhasználásával a speciális rendszereket is tartalmazó Callen-féle posztulátum-rendszer posztulátumai a következők:

0. *Posztulátum:* A koegzisztáló termodinamikai rendszerekből felépített termodinamikai rendszer teljes egyensúlyi állapota az alrendszerekből álló összetett rendszer egyensúlyi állapotaként tárgyalható.

A Callen-féle I. és II. posztulátum változatlan marad, a III. posztulátum alakja a következő lesz:

III. *posztulátum:* Az összetett rendszer entrópiája a részrendszerek entrópiájának összegeként nyerhető, additív. Az entrópia folytonos, differenciálható függvénye az extenzív paramétereknek. Normál rendszerek esetén az entrópia szigorúan növekvő függvénye a belső energiának.

A IV. posztulátum változatlan.

Az V. posztulátum alakja a következő lesz:

V. *posztulátum:* Normál rendszerek esetén

$$\lim_{E/V \rightarrow \infty} \frac{\partial S}{\partial E} = 0. \quad (1.30)$$

Annak következtében, hogy a speciális rendszerek egyensúlyi állapotban lehetnek normál rendszerekkel, a normál rendszerekre definiálva a hőmérséklet skálát ez már speciális rendszerekre is definiált hőmérsékleti skálát jelent.

A speciális rendszerek figyelembevétele nem automatikusan történik a Callen-féle posztulátum rendszer esetén, de más termodinamikai konstrukciók esetén is problémákat jelenthet a negatív abszolút hőmérséklet megjelenése.

A Carnot körfolyamat hatásfoka változik, nem teljesül a $0 < \eta < 1$ összefüggés, és az η irreverzibilis $< \eta$ reverzibilis összefüggés, ha $T < 0$. A hőmérsékleti skála bevezetésénél feltesszük, hogy $\frac{\partial E}{\partial S} > 0$.

A statisztikus termodinamikában látszólag nincs semmi probléma a negatív abszolút hőmérsékletek megjelenésekor, mert véleményem szerint a Callen posztulátum-rendszer kiegészítéséhez szükséges lépéseket, ott mint triviális lépéseket végezzük el.

1.3. Az egyensúlyi termodinamika extrémum elvei

Zárt rendszer esetén az entrópia maximum elv; (energia minimum elv rögzített $S, X_2 \dots X_{n+1}$); rögzített intenzív paraméterek esetén a megfelelő Legendre transzformált extrémuma határozza meg a rendszer állapotát. Abban az esetben, amikor a reservoir az i -edik kölcsönhatásnál az Y_i helyett a $Z = Z(Y, Y_2, \dots, Y_{n+1})$ mennyiséget tartja állandó értéken, a Q potenciálfüggvényekből Legendre transzformációval nyerhető általánosított Massieu-függvény lesz extrémális

$$M = Q - ZX_i, \quad (1.31)$$

ahol a Q függvényt meghatározó Γ^{ik} transzformációs mátrix i -edik sorát az alábbi összefüggés definiálja:

$$\Gamma^{ik} = \frac{\partial Z}{\partial Y_k} \quad (1.32)$$

A Γ^{ik} mátrix többi elemét az (1.18) és az (1.20) egyenletek határozzák meg [20].

Az egyensúlyi állapot stabilitási kritériuma az entrópiamátrix

$$s_{ik} = -\frac{\partial^2 s}{\partial X_i \partial X_k} \quad (1.10)$$

pozitív definitása.

1.4. Transzportfolyamatok termodinamikai tárgyalása

A termodinamika elveit a nem egyensúlyi rendszerekre a lokális egyensúly hipotézis segítségével terjeszthetjük ki, amely szerint olyan kicsi, de még makroszkopikus cellákra bonthatjuk a teljes rendszert, amelyek már egyensúlyi rendszereknek tekinthetők.

Ez a közelítés abban az esetben alkalmazható, amikor a rendszerben olyan folyamatokat, kölcsönhatásokat vizsgálunk, amelyek a térben és időben elegendően lassan változnak ahhoz, hogy a rendszert lokálisan egyensúlyinak tekinthessük, azaz a termodinamikai paraméterek lokálisan definiálhatók. Többkomponensű rendszerekben a definiálhatóságot az egyes komponensekre külön-külön követeljük meg, azaz lokálisan nem kell feltételezni a kémiai egyensúlyt.

Amikor a lokális egyensúlyt nem lehet feltételezni, a rendszer nem tárgyalható a konstruktív termodinamika módszereivel.

Tetszőleges rendszer időbeli viselkedését leírják a mérleg- és vezetési egyenletek. Ezek a termodinamikai rendszerről minden információt tartalmaznak, a megoldás azonban nehéz.

A termodinamikai vizsgálatok célja az, hogy a változások, folyamatok irányát, lehetőségességét határozza meg, ennek eszköze az extrémum elvek meghatározása. Univerzális extrémumelv nincsen, ezért közöljük a korlátozott érvényességi körű extrémum elveket.

1.4.1. Minimális entrópiaprodukció elve

A minimális entrópiaprodukció elvét *I. Prigogine* vezette be [26]. Az elv bizonyítása és érvényességi területének meghatározása:

A stacionaritási feltétel:

$$\operatorname{div} \mathbf{J}_i = 0. \quad (1.33)$$

Az entrópiaprodukció szélsőérték-feltétele:

$$\delta \left(\sum_i \mathbf{J}_i \operatorname{grad} Y_i \right) = 0; \quad (1.34)$$

azaz

$$\delta \left(\sum_{ik} L_{ik} \operatorname{grad} Y_i, \operatorname{grad} Y_k \right) = 0. \quad (1.36)$$

Az (1.33) és az (1.34) egyenletek megegyeznek, ha a vezetési mátrix rendelkezik a következő tulajdonságokkal:

$$\frac{\partial L_{ik}}{\partial Y_e} = 0; \quad (i, k, e = 1 \dots n), \quad (1.35)$$

a vezetési mátrix nem függ az intenzív paraméterektől,

$$\frac{\partial L_{ik}}{\partial \operatorname{grad} Y_e} = 0; \quad (i, k, e = 1 \dots n), \quad (1.36)$$

a vezetési mátrix nem függ a termodinamikai erőktől (az intenzív paraméterek gradienseitől) és

$$L_{ik} = L_{ki}, \quad (1.37)$$

az Onsager reláció [22] teljesül.

Ha a vezetési mátrix teljesíti az (1.35–37) egyenletekbe felsorolt feltételeket és a vezetési mátrix pozitív definit, a stacionárius állapotot a minimális entrópiaprodukció jellemzi. Az (1.35–37) feltételek általánosságban nem teljesülnek, ezért a minimális entrópiaprodukció elve nem univerzális elve a nem-egyensúlyi termodinamikának. Univerzális evolúciós elv nincs. A nem-egyensúlyi rendszerek vizsgálatára kidolgozott variációs elvek közül a legáltalánosabb a Gyarmati-féle Governing Principle [25].

1.4.2. Azon rendszerek körének kiterjesztése, amelyek stacionárius állapota extrémum elvvel jellemezhető. (Minimális P -produkció elve)

Nemegyensúlyi termodinamikai vizsgálatok esetén általában csak egy rendszert tárgyalunk, ez azt jelenti, hogy a Callen posztulátum-rendszer helyett használhatjuk az általánosított Callen posztulátum-rendszert [20], azaz az entrópia helyett használhatjuk a Q potenciálfüggvényeket.

A Q mérlegegyenlete:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = \int \sum_i \Gamma_i \frac{\partial q_i}{\partial t} d^3r, \quad (1.38)$$

mivel

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{J}_i = 0. \quad (1.39)$$

Az (1.38) egyenlet a következő alakban írható fel:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = \sum_i \nabla \Gamma_i \cdot \mathbf{J}_i \cdot d\mathbf{r}^3 + \int \sum_i \Gamma_i \mathbf{J}_i d\mathbf{f} = \int \pi d^3 r + \int \sum_i \Gamma_i \mathbf{J}_i d\mathbf{f}, \quad (1.40)$$

ahol:

π — a Q produkció.

$$\pi = \sum_i \Delta \Gamma_i \mathbf{J}_i, \quad (1.41)$$

$$\pi \equiv 0 \quad (1.42)$$

és $\pi=0$ csak egyensúlyi állapotban, azaz π ugyanolyan tulajdonságokkal rendelkezik, mint az entrópiaprodukció. A Q potenciál függvény használata esetén a vezetési mátrix

$$L_{ik}^Q = \sum_i (\Gamma^{-1})^{il} L_{lk}^S, \quad (1.43)$$

mivel a termodinamikai áramok nem függhetnek az intenzív paraméter reprezentáció kiválasztásától, azaz

$$\mathbf{J}_i = \sum_k L_{ik}^Q \nabla \Gamma_k = \sum_k L_{ik}^S \nabla Y_k. \quad (1.44)$$

A stacionárius állapotot a minimális q -produkció jellemzi, ha az L_{ik}^Q mátrix szimmetrikus, és nem függ az intenzív paraméterektől, ill. gradienseiktől.

A stacionárius állapotban minimális produkcióval rendelkező Q potenciál függvény transzformációs mátrixának definiáló egyenletei az (1.22) egyenletek és

$$\sum_l (\Gamma^{-1})^{il} L_{lk}^S = \sum_l (\Gamma^{-1})^{kl} L_{li}^S; \quad \sum_l \frac{\partial (\Gamma^{-1})^{il} L_{lk}^S}{\partial Y_m} = 0. \quad (1.45)$$

A gyakorlatban többször találkozhatunk olyan esettel, amikor az áramok, \mathbf{J}_i az \mathbf{X}'_k ; termodinamikai erőkké fejezhető ki, ahol

$$\mathbf{X}'_k = \text{grad } \Gamma_k \quad (1.46)$$

és

$$\mathbf{J}_i = L'_{ik} \mathbf{X}'_k \quad (1.47)$$

ahol L'_{ik} már független az intenzív paraméterektől, s amennyiben definiálható olyan Q potenciál, amelyhez a Γ_i intenzív paraméterek tartoznak, akkor az 1.22 és 1.48 feltételek automatikusan teljesülnek, ennek megfelelően a rendszer stacionárius állapotát a minimális Q produkció jellemzi.

Ennek speciális esetét vizsgálta P. Glansdorff és I. Prigogine (26, p. 49). A hővezetés jelenségét vizsgálva megmutatták, hogy a $\Gamma_1 = T$ termikus intenzív paraméter bevezetésével $\Gamma^{11} = T^2$ és a σ/T^2 minimális értéket vesz fel stacionárius állapotban, a minimum feltétel a

$$\nabla^2 T = 0 \quad (1.48)$$

egyenletet adja vissza.

Általános esetben az 1.22 és 1.48 egyenleteket kielégítő Γ^{ik} mátrix határozza meg a Q potenciál függvényt, amely minimális produkcióval rendelkezik stacionárius állapotban. A Γ^{ik} létezését általános esetre nem lehet bebizonyítani, azonban amint azt a hővezetés példája is mutatja vannak olyan rendszerek, ahol definiálható olyan

Q potenciálfüggvény, amelynek minimális produkciója jellemzi a stacionárius állapotot. A továbbiakban néhány példát mutatok arra, hogy lehet konstruálni olyan nem-triviális termodinamikai rendszereket, amelyek stacionárius állapota minimális P -produkcióval jellemezhető.

a) legyen

$$S_{ik} = \begin{pmatrix} S_{11}(Y_1, Y_2) & 0 \\ 0 & S_{22}(Y_1, Y_2) \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad L_{ik} = \begin{pmatrix} L_{11}(Y_1) & 0 \\ 0 & L_{22}(Y_2) \end{pmatrix} \quad (1.49)$$

Ekkor a

$$\Gamma_1 = \int L_{11}(Y_1) dY_1 \quad (1.50)$$

$$\Gamma_2 = \int L_{22}(Y_2) dY_2$$

Γ paraméterekkel definiált P -potenciál-függvény, $P = \Gamma_1 X_1 + \Gamma_2 X_2$ minimális produkcióval rendelkezik stacionárius állapotban.

b) legyen

$$S_{ik} = \begin{pmatrix} AY_1 & 0 \\ 0 & BY_2 \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad L_{ik} = \begin{pmatrix} aY_1 & bY_2 \\ bY_1 & dY_2 \end{pmatrix}. \quad (1.51)$$

Ebben az esetben

$$\Gamma_1 = Y_1^2/2 \quad \text{és} \quad \Gamma_2 = Y_2^2/2 \quad (1.52)$$

választással a P -potenciál-függvény differenciális alakja:

$$dP = Y_1^2/2 dX_1 + Y_2^2/2 dX_2 = \Gamma_1 dX_1 + \Gamma_2 dX_2, \quad (1.53)$$

a vezetési mátrix szimmetrikus és intenzív paraméter független,

$$L' = \begin{pmatrix} a & b \\ b & d \end{pmatrix}. \quad (1.54)$$

II. A TERMODINAMIKAI TRANSZPORTELMÉLET A SZUPRAVEZETŐ ÁLLAPOT VIZSGÁLATÁBAN

2.0. Bevezetés

A szupravezetés a szilárdtestfizikának az egyik legkidolgozottabb fejezete, azonban elméleti és gyakorlati jelentősége, megválaszolatlan problémái miatt továbbra is a kutatás izgalmas területe.

Jelen vizsgálatunk a szupravezetés egy lezártnak tekintett területével, a termodinamikai tárgyalással foglalkozik, mivel az irreverzibilis termodinamika szempontjából nem konzekvens a használt leírás. Célunk egy konzekvens termodinamikai leírás megadása (2.3. fejezet).

A szupravezetés legfontosabb elméleteit a 2.1.1. fejezetben röviden összefoglaljuk, a 2.1.2. fejezetben a szupravezetők termodinamikai vizsgálatával kapcsolatos irodalmi eredményeket ismertetjük.

A szupravezető állapot jellemző tulajdonságait az általunk kidolgozott kvalitatív modell keretein belül ismertetjük (2.2. fejezet).

A 2.3. fejezet tartalmazza a szupravezető állapot termodinamikai tárgyalását. Ezen belül meghatározzuk a szupravezető állapot jellemző termodinamikai paramétereit, a belső energia sűrűséget, a transzport folyamatok tárgyalásához szükséges termodinamikai erőket és áramokat. Megvizsgáljuk a szupravezető állapot termodinamikai stabilitási feltételeit.

A 2.3.1. fejezetben a szupravezető állapot belső energiáját határozzuk meg. Megmutatjuk, hogy a teljes leírás érdekében a normál állapothoz képest a szupravezető állapot leírásához további

paramétereket kell bevezetni, ezek: a szupravezető párok száma, a vortex szám, vortex rács deformációs tenzor.

A 2.3.2. fejezetben megmutatjuk, hogy a fázisátalakulások helyét az előző fejezetben kapott belső energia függvényből lezármasztatható Legendre transzformáltak jól leírják.

A 2.3.3. fejezetben a belső energia mátrix pozitív definitásából következő stabilitási kritériumokat határozzuk meg. Az irodalomban található stabilitási feltételeken túl további összefüggéseket nyertünk (a szupravezető elektronok számának, illetve a vortex szám hőmérséklet függésére vonatkozó egyenlőtlenségeket kaptuk).

A 2.3.4. fejezetben az irodalomban található termodinamikai leírások kritikai összefoglalását adjuk meg.

A 2.4. fejezetben a szupravezetőkben lejátszódó transzport folyamatok termodinamikai tárgyalását vizsgáljuk.

A 2.4.1. fejezetben a normál elektron-szupraelektron relaxáció termodinamikai leírását adjuk meg.

A 2.4.2. fejezetben az ideális (pinning mentes) II. típusú szupravezetők kevert állapotában lejátszódó transzport folyamatok termodinamikai leírásával kapcsolatos problémákat tárgyaljuk.

A 2.4.3. fejezetben a pinningek jelenléte esetén fellépő transzport jellemzőit vizsgáljuk. A 2.3. fejezetben meghatározott belső energia-sűrűség segítségével lezármasztjuk a kritikus állapot egyenletét, amely eltér az irodalomban használt kritikus állapot egyenlettől, mivel ez tartalmazza a háromszöggrács szerkezet torzulásából származó erőhatásokat is.

A 2.4.4. fejezetben a kis GL paraméterű szupravezetők nemlineáris flux-flow karakterisztikájának leírására dolgozunk ki egy modellt, amely összhangban áll a kísérleti eredményekkel.

2.1. Irodalmi áttekintés

2.1.1. A szupravezetés alapelméletei

H. Kammerlingh—Onnes [33] tiszta fémek ellenállását mérte hélium hőmérsékleten és a higany ellenállásának eltűnését tapasztalta. Ma már 27 fémről és kb. 1500 ötvözettről ismert, hogy szupravezetővé válnak.

W. Meissner és R. Oschsenfeld [34] ón és ólom mintákat vizsgáltak H külső mágneses térben, és azt tapasztalták, hogy ha $H < H_c$ (az anyagra jellemző kritikus tér érték), akkor T_c hőmérsékleten a mágneses tér hirtelen és teljes mértékben kiszorul a mintából (egy vékony felületi réteget kivéve), azaz a minta tökéletes diamágnes.

A szupravezetők alacsony frekvenciájú elektrodinamikai tulajdonságainak elméletét *F. és H. London* dolgozta ki [35].

A London egyenletek azon a hipotézisen alapulnak, hogy a szupravezető elektronok ellenállás nélkül mozognak a mintában; a szupravezető állapotot olyan koherencia jellemzi, amelyet a mágneses tér nem befolyásol lényegesen.

A London egyenletek

$$\frac{4\pi}{c} \operatorname{rot}(\lambda \mathbf{j}_s) + \mathbf{H} = 0, \quad (2.1.1)$$

$$\frac{4\pi}{c_2} \frac{\partial}{\partial t} (\lambda \mathbf{j}_s) - \mathbf{E} = 0 \quad (2.1.2)$$

ahol: λ a London-féle behatolási mélység.

$$\lambda^2 = \frac{c^2}{4\pi} \frac{m}{ne^2}, \quad (2.1.3)$$

ahol m az elektron tömeg, n az elektronsűrűség; λ értéke tiszta fémekben 10^{-6} cm nagyságrendű.

A termodinamikai vizsgálatok első sikerét a Gorter—Casimir-féle [36] kétfolyadékos modell jelentette. A Gibbs potenciál segítségével meghatározták a fázisátalakulásnál végzett munkát

$$G_n(H) - G_s(0) = \frac{H_c^2}{8\pi}. \quad (2.1.4)$$

Kiszámították a szupravezető és a normál állapot entrópia különbségét

$$\Delta S = S_s - S_n = \frac{1}{4\pi} H_c \frac{dH_c}{dT} < 0 \quad (2.1.5)$$

ez azt mutatja, hogy a szupravezető állapot rendezettebb, mint a normál állapot. A termodinamikai megközelítés igazi sikerét a Ginzburg—Landau elmélet jelentette [2], amely a Landau-féle másodfajú fázisátalakulások elméletén alapszik. E szerint II. fajú fázisátalakulás esetén a szabadenergia sorbafejthető az ε rendparaméter szerint, amelyre teljesül, hogy $\varepsilon=0$ a fázisátalakulási pontban, és az átalakulási pont felett, illetve folyamatosan nullához tart a másik oldalon. Ennek megfelelően a szupravezető elektronrendszer szabadenergiasűrűsége mágneses tér jelenlétében (a rendparaméter ψ),

$$F_s(H) = F_n(0) + \int \left[\alpha(T) \cdot |\psi|^2 + \frac{\beta(T)}{2} \cdot |\psi|^4 + \frac{1}{2m} |\hat{p}\psi|^2 + \frac{H^2}{8\pi} \right] d^3r, \quad (2.1.6)$$

ahol a ψ rendparaméter hullámfüggvény tulajdonságokkal rendelkezik, $|\psi|^2 = n_s$.

A szabadenergia minimum feltétel a következő egyenleteket eredményezi

$$\alpha + \beta |\psi|^2 \psi + \frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla - \frac{2e}{c} \mathbf{A})^2 \psi = 0 \quad (2.1.7)$$

III.

$$\mathbf{J}_s = \frac{e\hbar}{2im} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) - \frac{e^2}{mc} |\psi|^2 \mathbf{A} = \frac{c}{4\pi} \text{rot } \mathbf{H}. \quad (2.1.8)$$

A mikroszkopikus elmélet kidolgozását az izotópeffektus felfedezése [37], és az energia-hézag felismerése [35] és kimérése [38] tette lehetővé. A szupravezetés mikroszkopikus elméletét *J. Bardeen*, *L. N. Cooper* és *J. R. Schrieffer* dolgozta ki [1]. Az elmélet szerint a szupravezetésért az elektronfonon kölcsönhatás a felelős, mivel ez az elektronok között effektív vonzó kölcsönhatást eredményez, ha

$$(E_k - E_{k+q}) < \hbar \omega_q, \quad (2.1.9)$$

ahol ω_q a fonon frekvencia.

A szupravezető állapotot leíró redukált Hamilton operátor a következő alakban írható fel:

$$H = H_0 + \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3} V_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_2}^+ a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} \quad (2.1.10)$$

Cooper [39] megmutatta, hogy azok a rendszerek, amelyekben $V < 0$, nem stabilak az elektronpár képződéssel szemben, a pár állapotokat nem lehet perturbáció-

számítással megkapni, ezért olyan hullámfüggvényből kell kiindulni, amely már tartalmazza a párállapotokat, például vezessük be a

$$B_k^+ = a_{k\uparrow}^+ a_{k\downarrow}^+ \quad B_k = a_{-k\downarrow} a_{k\uparrow} \quad (2.1.11)$$

párkeltő, illetve eltüntető operátorokat, ezek nem fermionok és nem bozonok. A ψ hullámfüggvény

$$\psi = \prod_k (\sqrt{h_k} + \sqrt{1 - B_k} |0\rangle). \quad (2.1.12)$$

A h_k értékének meghatározása az energia minimum feltételéből történik

$$\frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \min. \quad (2.1.13)$$

Ebből

$$h_k = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\varepsilon_k - \mu}{\sqrt{E_k^2 + (\varepsilon_k - \mu)^2}} \right), \quad (2.1.14)$$

ahol μ a kémiai potenciál.

A pár kötési energia (energia hézag)

$$E_k = \sum_k V_k \sqrt{h_k} \sqrt{1 - h_k}. \quad (2.1.15)$$

A BCS elméletből a Ginzburg—Landau egyenleteket *Gorkov* [2.c.] vezette le.

2.1.2. A szupravezetők termodinamikai vizsgálatára vonatkozó irodalmi eredmények összefoglalása

A szupravezető állapot entrópia függvényét *Schmid* az alábbi alakban írta fel. [40]:

$$dQ_s = \frac{dQ_E}{T} - \frac{\mu}{T} dn - \frac{\mathbf{j}_s^n}{T} d\mathbf{p}_s. \quad (2.1.16)$$

ahol Q_E az energiasűrűség, n a részecskeszám, \mathbf{j}_s^n a szuperfolyékony részecske áram, μ a kémiai potenciál, \mathbf{p}_s a szuperfolyékony impulzus. A mérlegegyenleteket az alábbi alakban írta fel:

$$\begin{aligned} \dot{Q}_E + \text{div}(\mathbf{J}_E + \hat{\mathbf{J}}_E) &= 0 \\ \dot{n} + \text{div}(\mathbf{J}_s^n + \hat{\mathbf{J}}_n) &= 0 \\ \dot{P}_s + \text{grad}(\mu + \hat{\mu}) &= 0. \end{aligned} \quad (2.1.17)$$

ahol a kalapos mennyiségek a nemegyensúlyi járulékokat reprezentálják. Az entrópia-produkció értéke:

$$\sigma = \hat{\mathbf{J}}_E \text{grad} \frac{1}{T} + \hat{\mathbf{J}}_n \text{grad} \frac{-\mu}{T} + \hat{\mu} \text{div} \frac{-\mathbf{J}_s^n}{T}. \quad (2.1.18)$$

A vezetési egyenletek:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{J}}_E &= k(-\text{grad } T) + \alpha T \mathbf{E} + (T/e) \cdot \beta \mathbf{p}_s \text{div } \mathbf{j}_s \\ \hat{\mathbf{j}}'' &= \alpha(-\text{grad } T) + \sigma \mathbf{E} + \gamma \mathbf{p}_s \text{div } \mathbf{j}_s \\ \hat{\mu} &= \beta \mathbf{p}_s(-\text{grad } T) + e \gamma \mathbf{p}_s \mathbf{E} + (1/e) \zeta \text{div } \mathbf{j}_s.\end{aligned}\quad (2.1.19)$$

A Schmid által javasolt leírás leglényegesebb problémái:

a) A forrás-áram szétbontás önkényes, mivel a felhasznált közelítések mellett az az impulzus mérlegegyenlet alakja a következő:

$$\mathbf{p}_s + \text{Div } \mathbf{P} = \text{grad } \mu.$$

b) A Schmid által használt vezetési egyenlet ellentmond a Curie elvnek, amely értelmében izotrop rendszerben különböző tenzori rangú mennyiségek között nem léphet fel kicserélődés.

c) Nehezen általánosítható kevert állapotra.

A II. típusú szupravezetők kevert állapotának termodinamikai tárgyalását az tette nagyon aktuálissá, hogy meg kellett határozni a vortexekre ható erőt transzport áram jelenléte esetén.

Ezen a területen Friedel, de Gennes és Matricon munkája tekinthető első lépésnek [41], amelyben a transzport-áram hatására fellépő erőt termodinamikai analógiával határozták meg. Egy A felületet vizsgáltak, amelyen N egyenes vortexfonal ment át. Az egységnyi vortex hossza jutó nyomással analóg a

$$P = -\frac{\partial f A}{\partial A} = f - A \frac{\partial f}{\partial A} \quad (2.1.20)$$

mennyiség (ahol f a szabadenergia sűrűség). Konstans vortex szám esetén ($N=AB$) $\rho_0 = \text{konst.}$ $d(AB)=0$, így

$$P = -f + B \frac{\partial f}{\partial B}. \quad (2.1.21)$$

A mozgató erő $F_m = -\frac{dp}{dx}$, azaz

$$F_m = -B \frac{d^2 f}{dB^2} = -BJ. \quad (2.1.22)$$

A fenti összefüggés nehezen általánosítható három dimenziós esetre.

Josephson megmutatta [42], hogy amikor a vortex rács deformációs vektora $\beta(r)$, a mágneses indukció változás $\partial \mathbf{B} = \text{rot}(\beta \times \mathbf{B})$; ennek felhasználásával Campbell, Evetts és Dew-Hughes [43] kiszámították a vortex kémiai potenciál változását

$$\text{grad } \mu = \Phi_0 \times \mathbf{J}, \quad (2.1.23)$$

amely segítségével a kritikus állapot egyenlet alakja:

$$\mathbf{B} \times \text{rot } \mathbf{H} + s^+ \cdot \text{grad } T = \mathbf{F}_p \quad (2.1.24)$$

ahol s^+ a transzport entrópia, \mathbf{F}_p a pinning erő [44].

2.2. A szupravezető állapot

A jelen fejezetben a szupravezető állapot kvalitatív leírását dolgoztuk ki [45, 46, 47]. Alapvető kvantummechanikai, termodinamikai és elektrodinamikai elvek felhasználásával, az alábbi kísérleti eredményekből kiindulva leszarmasztattuk a szupravezető állapot jellemző paramétereit.

1. Szupravezető állapotban az elektromos vezetőképesség végtelen.
2. $H < H_c$ külső mágneses térben a minta tökéletes diamágnes, $H > H_c$ esetén normál.
3. A szupravezető-normál átmenet során elsőrendben változás csak az elektronok állapotában van.

Megmutatjuk, hogy $H_{c1} < H < H_{c2}$ külső mágneses térben a tér fluxus fonalak alakjában hatol be a mintába, amelyek háromszögrácsot alkotnak.

A leírás módszertanilag, probléma megközelítésében új. A fizikai elvek tartalmának felhasználásával kvantummechanikai számítások elvégzése nélkül leszarmasztatjuk azokat az összefüggéseket, amelyek segítségével a szupravezetők „makroszkopikus” tulajdonságai tárgyalhatók.

2.2.1. A szupravezető állapot jellemzése

Tökéletes vezető minta belső energiájának elektromágneses része H külső mágneses térben:

$$E_{\text{em}} = E_{\text{kin}} + E_{\text{tér}}, \quad (2.2.1)$$

ahol E_{kin} az elektronok kinetikus energiája.

$$E_{\text{kin}} = \int \frac{n_t m v^2}{2} d^3x = \int \frac{m}{2ne^2} \mathbf{j}^2 d^3x = \frac{1}{8\pi} \int \lambda^2 (\text{rot } \mathbf{h})^2 d^3x,$$

ahol n_t a tökéletes vezető elektronsűrűség, m az elektrontömeg, v az elektronsebesség, \mathbf{j} az áramsűrűség, \mathbf{h} a lokális mágnesestér,

$$\lambda^2 = \frac{mc^2}{4\pi n_t e^2} \quad (2.2.2)$$

$E_{\text{tér}}$ a behatoló elektromágneses tér energiája, mivel egyensúlyi állapotban az elektromos térerősség zérus, az $E_{\text{tér}}$ az alábbi alakban írható fel:

$$E_{\text{tér}} = \frac{1}{8\pi} \int \mathbf{h}^2(\mathbf{x}) d^3x.$$

A mágneses tér eloszlását az energia-minimumfeltételből határozhatjuk meg, a 2.2.1. egyenletet \mathbf{h} szerint variálva kapjuk,

$$\delta E = \frac{1}{4\pi} \int (\delta \mathbf{h} (\mathbf{h} + \lambda^2 \text{rot rot } \mathbf{h}) + \frac{1}{8\pi} \delta (\mathbf{h} \times \text{rot } \mathbf{h}) d\mathbf{f}. \quad (2.2.3)$$

Egyszeresen összefüggő tartomány esetén a jobb oldalon levő második tag zérust eredményez, az energia-minimumhoz tartozó mágneses téreloszlást az alábbi (London) egyenlet határozza meg:

$$\mathbf{h} + \lambda^2 \text{rot rot } \mathbf{h} = 0 \quad (2.2.4)$$

$\mathbf{h} = (0, 0, h_z(x))$ esetben a megoldás:

$$\mathbf{h} = h_z(0)e^{-x/\lambda} \cdot \hat{\mathbf{z}}.$$

A mágneses tér λ tartományon lecseng, nem hatol be a mintába, ezért λ -t behatolási mélységnek nevezzük.

Az energia minimum feltételből megkaptuk, hogy a külső mágneses tér csak egy felületi (kb. λ vastagságú) rétegbe hatol be, azaz a minta tökéletes diamágnes ha végtelen a vezetőképessége. Azonban külső mágneses térben nem a belső energia, hanem a Gibbs potenciál minimuma határozza meg a stabil állapotot. Normál állapotban

$$G_n = E_n - \frac{HB}{4\pi} = E_n(H=0) - \frac{H^2}{8\pi}.$$

Tökéletes diamágnes állapotban

$$G_s = E_s(H=0).$$

A tökéletesen diamágneses állapot csak akkor valósul meg, hogyha ebben az állapotban a Gibbs potenciál kisebb, mint a mágneses tér jelenléte esetén fellépő állapotban, azaz a szupravezető állapot és a normál állapot belső energiájának kapcsolata:

$$E_s = E_n - H_c^2/8\pi. \quad (2.2.5)$$

A szupravezető állapot energiája $H_c^2/8\pi$ értékkel kisebb, mint a normál állapotban, s ez a különbség az elektronrendszer energiájának változását jelenti, mivel elsőrendben csak az elektronállapotban van változás, ebből az egy elektronra jutó energia-változás az alábbi összefüggésből határozható meg:

$$N(0)E_k^2/2 = H_c^2/8\pi, \quad (2.2.6)$$

ahol $N(0)$ az állapotsűrűség a Fermi szinten, E_k az egy elektronra jutó energiaváltozás (csökkenés). A 2.2.6. összefüggés alkalmazhatóságát biztosítja, hogy $E_k \ll E_F$.

Az energiacsökkenést általában kötött állapot kialakulásával lehet leírni, esztünkben elsőrendű változás csak az elektronállapotban van, és az elektronok nem lokalizált jellege megmarad (végtelen vezetőképesség), a fenti feltételeknek eleget tehetünk, ha feltételezzük, hogy az elektronok egymással kerülnek kötött állapotba, elektronpárok alakulnak ki.

Ezek a párok nem lehetnek párok a szó klasszikus értelmében, hiszen elektronok egymáshoz rendelése a párokban ellentétben áll a kvantummechanikával, az elektronok megkülönböztethetlenségével. Az elektronpár-rendszer csak úgy képzelhető el, hogy van egy kölcsönhatás („ütközés”), amely a párállapotokat egymásba viszi át, s így csatol ki energiát a rendszerből.

Ez a kép már megszorítást ad a párban egymáshoz rendelt elektronokra, ha ez a kölcsönhatás az impulzusmomentumot és az impulzust megőrzi (s ez teljesül) akkor maximális mértékben mehetnek végbe ezek az energiát kicsatoló szórások, ha nincs impulzus és impulzusmomentum megszorítás, azaz valamennyi párállapot-

ban azonos az impulzus és a spin, azaz zérus értékű (zérustól különböző impulzus áramot jelent). Ekkor a párban szereplő elektronok ellentétes impulzusúak és ellentétes spinűek.

A szupravezető állapotot biztosító kölcsönhatás (szórás) során a zérus spinű és zérus impulzusú párok szóródnak. Azt, hogy a szupravezető elektronpárok csak dinamikusan, állandó szóródásokon keresztül létezhetnek, mutatja az, hogy a párban szereplő elektronok ellentétes sebességgel (amelynek abszolút értéke a Fermi sebesség, V_F) mozognak, így szórás nélkül rövid idő alatt a minta ellentétes szélein lennének, azaz nem létezhetnének párok.

Kvantummechanikai számításokkal megmutatható, hogy az elektron-fonon kölcsönhatás effektív vonzást eredményezhet az elektronok között, s ez megfelel a két elektronból álló, zérus spinű és zérus impulzusú párok energiacsökkentő kölcsönhatásának. Az elektron-fonon kölcsönhatás szerepét mutatja az izotóp effektus, amely értelmében a kritikus hőmérséklet az izotóp tömeg négyzetgyökével fordítottan arányos [37].

2.2.2. A szupravezető állapot jellemző paraméterei

A szupravezető elektronpárok csak dinamikusan, állandó ütközéseken keresztül létezhetnek. Ebből következik, hogy véges T élettartamuk van, amely az ütközések közötti átlagos időnek felel meg. A párban szereplő elektronok a két ütközés között $2v_F T$ távolságot tesznek meg, így a pár mérete is véges. A határozatlansági reláció értelmében a kanonikusan konjugált mennyiségek bizonytalanságának szorzata nagyobb, mint $\hbar/2$. A pár élettartama a pár időbizonytalanságnak. A kötési energia a párban szereplő elektronok energia csökkenése a normál állapothoz képest, a 2.2.6. alapján

$$E_k = \sqrt{2 \frac{H_c^2}{\pi 4 N(0)}}. \quad (2.2.7)$$

A határozatlansági relációból meghatározott párélettartam:

$$T = \frac{\hbar}{2E_k}. \quad (2.2.8)$$

A pár átlagos mérete:

$$\xi_0 = 2v_F T = \frac{2v_F \hbar}{E_k}. \quad (2.2.9)$$

Ha a szupravezetőben egy pontszerű zavart hozunk létre, amely a zavar helyén megszünteti (vagy csökkenti) a szupravezető ütközéseket, akkor ez olyan távolságon érezteti hatását, amíg az újabb ütközések vissza nem állítják a szupravezető állapotot (a párokat). Ez a távolság a pár kiterjedésnek felel meg, ezért ξ -t koherenciahossznak nevezzük.

A határozatlansági relációból meghatározhatjuk az impulzus bizonytalanságot:

$$q_0 = \frac{\hbar}{2\xi_0} = \frac{E_k}{2v_F}. \quad (2.2.10)$$

A 2.2.10. egyenlettel meghatározott q_0 az impulzus bizonytalanság alsó korlátja. Másik oldalról vizsgálva ez azt jelenti, hogy a pár-ütközések akkor mehetnek végbe, amikor a párok impulzusa kisebb, mint q_0 . Külső zavarok esetén pedig a párok addig maradhatnak fenn, amíg a zavar által eredményezett impulzusváltozás (q_z) kisebb, mint q_0 . Gyengébb zavarok esetén a pár kiterjedésének (koherenciahossznak) nőnie kell, mivel a véges méretből és a zavarból származó impulzus bizonytalanság eredője nem haladhatja meg a q_0 értéket, azaz

$$q_0^2 = (h/\xi_z)^2 + q_z^2. \quad (2.2.11)$$

A zavartól függő koherenciahossz:

$$\xi_z = \frac{\xi_0}{\left[1 - \left(\frac{q_z \xi_0}{h}\right)^2\right]^{1/2}}. \quad (2.2.12)$$

2.2.3. A hőmérséklet hatása

A hőmérséklet hatása a szupravezető állapotban abból származtatható, hogy $T \neq 0K$ hőmérsékleten egy szabadsági fokra $\frac{1}{2} k_B T$ energia jut (ahol k_B a Boltzmann állandó).

Az ebből eredő impulzus bizonytalanság

$$q_T = 3k_B T / 2v_F. \quad (2.2.13)$$

A hőmérséklettől függő koherenciahossz a 2.2.12. felhasználásával nyerhető:

$$\xi_T = \frac{\xi_0}{\left(1 - \left[\frac{3T\xi_0}{hv_F}\right]^2\right)^{1/2}} \quad (2.2.14)$$

A koherenciahossz (pár kiterjedés) végtelenné válik, a szupravezetés megszűnik, ha $T = hv_F / 3\xi_0$. Ezt a hőmérsékletet kritikus hőmérsékletnek nevezzük.

A kötési energia hőmérséklet-függését a koherenciahossz hőmérséklet-függése határozza meg a 2.2.9. összefüggés alapján:

$$E_k(T) = E_k(0) \left[1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^2\right]^{1/2}. \quad (2.2.15)$$

A kötési energia $T = T_c$ hőmérsékleten nullává válik.

2.2.4. A mágneses tér hatása

A kísérleti eredmények azt mutatják, hogy vannak olyan szupravezetők, amelyek $H < H_c$ térben tökéletes diamágnesek, $H = H_c$ térben normállá válnak. Az alábbiakban azt a mechanizmust keressük, amellyel a mágneses tér „felszakítja” a párokat, megszünteti a szupravezetést.

A problémát többféleképpen közelíthetjük meg:

A szupravezetés megszűnésére logikailag az alábbi eseteket különböztethetjük meg:

1. A külső mágneses tér a felületen olyan áramot indukál, hogy az impulzus meghaladja a q_0 értékét. Ekkor a felületen a párok felszakadnak s a behatolás lavinaszerű.
2. A mágneses tér behatolása térfogatává válik, amikor a ξ vastagságú rétegben folyó áram nem tudja már leárnyékolni a külső teret.
3. A szupravezetés megszűnik, amikor a Lorentz-erő hatására T idő alatt bekövetkező impulzus-változás meghaladja a q_0 (2.2.10) értéket.

Az alábbiakban meghatározzuk a fenti esetekhez tartozó kritikus mágneses tér értékeket.

1. Maximális szupravezető áram esetén a párok impulzusa q_0 , ebből a maximális megengedett szupravezető-áramsűrűség:

$$j_{s\max} = \frac{neq_0}{m} = \frac{neh}{m2\xi}. \quad (2.2.18)$$

Egy tengelyirányú H_k mágneses térbe helyezett, henger alakú szupravezető minta felületén

$$j_F = \frac{c}{4\pi} \frac{1}{\lambda} H_k \quad (2.2.19)$$

áram folyik. A felület normállá válik, ha $j_F = j_{s\max}$, ebből a kritikus mágneses tér értéke:

$$H_c = \frac{4ne}{cm\hbar 2\xi} = \frac{1}{2\pi} \frac{\Phi_0}{\lambda\xi} \quad (2.2.20)$$

ahol $\Phi_0 = hc/2e$.

A 2.2.20. egyenlet lehetővé teszi a λ -ban szereplő n meghatározását. Ha az E_k helyére behelyettesítjük a 2.2.7. kifejezést, megkapjuk, hogy n megegyezik a teljes elektronsűrűséggel. Ez első pillantásra meglepő eredmény, mivel azt várnánk, hogy a szupravezető elektronsűrűség megegyezik a szupravezető kölcsönhatásban résztvevő párokban levő elektronok sűrűségével. $(N(0)E_k)$, azonban az áram hatására az impulzustérben az elektronrendszer q impulzussal eltolódik, a tökéletes vezetés megmarad, amíg a párok nem szakadnak fel.

A tökéletesen vezető elektronok csak akkor létezhetnek, amikor vannak szupravezető párok, ezért várható, hogy

$$n_t = n_t(T=0) \cdot f(n_p) \quad (2.2.21)$$

az $f(n_p)$ függvényről csak azt tudjuk megmondani, hogy $f(T=0)=1$ és $f(T=T_c)=0$, valamint azt, hogy monoton függvény, első közelítésben felírhatjuk, hogy

$$n_t(t) = n_t \cdot \frac{n_p(T)}{n_p(T=0)} = n_t \sqrt{1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^2}.$$

2. A kritikus mágneses tér értékét meghatározhatjuk abból a feltételből, hogy a külső mágneses tér hatása addig tekinthető felületinek, amíg a felületi áram (azaz egy ξ vastagságú rétegben folyó áram) le tudja azt árnyékolni.

Axiális mágneses térbe helyezett henger alakú (sugár: r_0) szupravezető minta esetén a határfeltételek:

$$\begin{aligned} j(r) &= j_{s \max}, \quad \text{ha } r > r_0 - \xi \quad \text{és} \quad j(r) = 0, \quad \text{ha } r < r_0 - \xi, \\ H(r) &= H_k, \quad \text{ha } r = r_0 \quad \text{és} \quad H(r) = 0, \quad \text{ha } r < r_0 - \xi, \end{aligned} \quad (2.2.22)$$

$$H \cdot 2\pi r_0 = 2\pi r_0 \cdot j_{s \max} \xi = 2\pi r_0 \frac{\varphi_0}{2\pi \lambda^2 \xi} \xi$$

azaz a kritikus mágneses tér nagysága:

$$H_{c1} = \frac{\varphi_0}{2\pi \lambda^2}.$$

A 2.2.22. egyenlettel meghatározott H_{c1} kritikus mágneses tér érték nem egyezik meg a H_c -vel, mivel λ és ξ általában nem egyezik meg.

Amikor azonban $\lambda < \xi$, akkor $H_k < H_{c1}$ térig a minta tökéletes diamágnes, a H_{c1} külső mágneses térben a mágneses tér behatolása térfogatívá válik. ξ vastagságú rétegben maximális szupraáram folyik, viszont a mágneses térnek le nem árnyékoltsa része behatol a minta belsejébe, ennek megfelelően a H_c tér elérése nem viszi át a mintát normál állapotba, a mágneses viselkedésre ennek a térnek nincs hatása.

A továbbiakban először megvizsgáljuk azt, hogy a mintába behatoló tér mikor szünteti meg a szupravezető állapotot, majd a 2.2.5. fejezetben megvizsgáljuk azt, hogy milyen alakban hatol be a tér a mintába.

3. A mágneses tér behatolása esetén a szupravezetés megszűnését abból a feltevéstől határozhatjuk meg, hogy a mágneses tér olyan mérvű impulzusváltozást eredményez, hogy a „szupravezető párképző” ütközések már nem mehetnek végbe, azaz

$$q_z = 2|\mathbf{F}_L|\tau_p = q_0, \quad (2.2.25)$$

ahol $|\mathbf{F}_L|$ a Lorentz erő,

$$|\mathbf{F}_L| = \left| \frac{e}{c} (\mathbf{v}_F \times \mathbf{H}) \right| \quad (2.2.26)$$

azaz

$$\frac{h}{\xi} = \frac{2ev_f H_k}{c} \frac{\xi}{v_f}. \quad (2.2.27)$$

Ebből a felső kritikus térerősség (H_{c2})

$$H_{c2} = \frac{1}{2\pi} \frac{\varphi_0}{\xi^2}. \quad (2.2.28)$$

2.2.5. A II. típusú szupravezetők leírása

A 2.2.1. fejezetben megmutattuk, hogy $\xi < \lambda$ és $\xi > \lambda$ esetén külső mágneses térben a szupravezető anyagok különböző viselkedést mutatnak. ($\kappa = \lambda/\xi$ paraméter a Ginzburg—Landau (GL) paraméter.) $\lambda < \xi$ esetén a minta $H = H_c$ térben normállá válik, ezeket az anyagokat I típusú szupravezetőknek nevezzük. $\lambda > \xi$ esetén $H < H_{c1}$ mágneses térben a minta tökéletes diamágnes, $H_{c1} < H < H_{c2}$ mágneses

térben a minta szupravezető tulajdonságokat mutat, azonban a felületen folyó Meissner-áramok nem tudják teljesen leárnyékolni a külső teret, így a minta nem tökéletesen diamágneses, ezt az állapotot kevert állapotnak nevezzük.

$H = H_{c2}$ mágneses térben a minta normállá válik. $\lambda > \xi$ anyagokat II. típusú szupravezetőknek nevezzük.

A mintába behatoló mágneses tér eloszlásának meghatározásához írjuk fel az energia minimum 2.2.3. feltételét:

$$\delta E = \int \delta \mathbf{h} (\mathbf{h} + \lambda^2 \text{rotrot } \mathbf{h}) d^3x - \int \delta (\mathbf{h} \times \text{rot } \mathbf{h}) df = 0.$$

Egyszeresen összefüggő szupravezető tartomány esetén a második tag zérust eredményez, azaz nem lehetséges térfogati behatolás, mivel a mágneses tér $\exp(-x/\lambda)$ alakban lecsökken. A tér behatolásának szükséges feltétele, hogy a szupravezető minta „kilyukadjon” (ez úgy lehetséges, hogy normál tartomány(ok) alakulnak ki). A normál tartomány kialakulásához H_{c2} tér szükséges, viszont a normál — szupra határon a tér nem lehet H_{c1} -nél nagyobb, mivel ekkor ismét instabil felületi réteget kapunk. Véges méretű normál tartomány így nem alakulhat ki.

Amikor a mágneses tér csak egy pontban éri el a H_{c2} értéket, akkor a fenti ellentmondás megszűnik. (A zavar ξ sugarú tartományra terjed ki, a kondenzációs energia-csökkenés $H_c^2 \xi^2 \pi / 8\pi$.) A képződmény szerkezetéről azt lehet elmondani, hogy a középpontban $H = H_{c2}$, köráramok indukálódnak, amelyek csökkentik a lokális tér értékét (kifele haladva), $r \sim \xi$ értéknél a mágneses tér H_{c1} -re csökken, innen a tér $h = H_{c1} \exp(-(r-\xi)\lambda)$ alakban írható fel. Amikor a külső tér z -vel párhuzamos, a mintába behatoló tér is z irányú, ekkor a minimális kondenzációs energiaváltozást akkor kapunk, amikor a $h = H_{c2}$ mágneses terű pontokat összekötő görbe a z tengellyel párhuzamos egyenes. Ezt az egyenest a körülötte kialakuló köráramokkal együtt mágneses fluxusfonalnak (vortexnek) nevezzük.

A vortex mágneses fluxusának meghatározásához két megszorítást kell figyelembe venni. A Bohr-féle kvantálási feltételből következik, hogy a vortexbe zárt fluxus $F = n\varphi_0$ ($n=1, 2, \dots$). A fluxus felső korlátját adja az alábbi tér-eloszlás

(ha $r < \xi$) $h = H_{c2}$, $h = H_{c1}$, ha $r = \xi$, és $h = H_{c1} \cdot \exp\left(-\frac{r-\xi}{\lambda}\right)$, $r > \xi$.

Ebből következik, hogy $F < \varphi_0 \cdot (1 + \xi/\lambda) < 2\varphi_0$, azaz $F = \varphi_0$.

A London egyenlet módosított alakja a vortexek jelenléte esetén

$$\mathbf{h} + \lambda^2 \text{rotrot } \mathbf{h} = \varphi_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}) \hat{\mathbf{z}}. \quad (2.2.30)$$

A vortexeket köráramok alakítják ki, az azonos köráramok taszítják egymást, energiaminimumnak a maximális távolság felel meg, két dimenziós esetben ez háromszógrács esetén valósul meg.

2.2.6. A kvalitatív leírás eredményeinek összehasonlítása a mikroszkopikus számítások eredményeivel

Ebben a fejezetben összehasonlítjuk a kvalitatív leírás segítségével nyert szupravezető paramétereket a mikroszkopikus elmélet alapján számoltakkal.

Paraméter	Kvalitatív	Mikroszkopikus
H_c	$\frac{1}{4\pi} \frac{\varphi_0}{\lambda \xi}$	$\frac{1}{2\sqrt{2}\pi} \frac{\varphi_0}{\lambda \xi}$
H_{c1}	$\frac{1}{4\pi} \frac{\varphi_0}{\lambda^2}$	$\frac{1}{4\pi} \frac{\varphi_0}{\lambda^2} (\ln \kappa + 0,08)$
H_{c2}	$\frac{1}{2\pi} \frac{\varphi_0}{\xi \lambda^2}$	$\frac{1}{2\pi} \frac{\varphi_0}{\xi^2}$
T_c	$0,33 \frac{v_F h}{\xi_0 k_B}$	$0,18 \frac{h v_F}{k_B \xi_0}$
E_k	$\frac{H_c^2(0)}{4\pi N(0)}$	$\frac{H_c^2(0)}{4\pi N(0)}$
ξ_0	$\frac{h v_F}{E_K}$	$\frac{h v_F}{\pi E_K}$
$\xi(T)$	$\xi_0 \left(1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^2\right)^{-1/2}$	$0,74 \xi_0 \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{-1/2\kappa^*}$
$\lambda(T)$	$\lambda_0 \left(1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^2\right)^{-1/4}$	$\lambda_0 \left(1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^4\right)^{-1/2\kappa^*}$
kritikus	1	$\frac{1}{\sqrt{2}}$
rácsszerkezet háromszög		háromszög

Megjegyzés:

$$* \quad 1 - \frac{T}{T_c} \ll 1.$$

Összefoglalásképpen elmondhatjuk, hogy a szupravezetők jellemző paramétereit, és ezek hőmérsékletfüggését a kvalitatív leírás jól visszaadja.

2.3. A szupravezető állapot termodinamikai leírása

2.3.1. A belső energia meghatározása

Egy rendszer termodinamikai leírásához a rendszert jellemző termodinamikai kölcsönhatásokat, a jellemző extenzív és intenzív paramétereket kell meghatározni. A termodinamikai rendszerről az

$$E = \sum_i Y_i X_i \quad (2.3.1)$$

belső energiafüggvény minden információt tartalmaz.

Külső elektromágneses tér jelenléte nélkül a szupravezető állapot belső energiája

$$E_s = TS_s - PV_s - \sum_i \mu_i^s N_i^s, \quad (2.3.2)$$

ahol S_s az entrópia, V_s a térfogat, μ_i^s a kémiai potenciál, N_i^s a részecskeszám a szupra-vezető állapotban. A normál és a szupra-vezető állapot szabad entalpiájának kapcsolata $H=0$ külső térben:

$$H_s = H_n - H_c^2/8\pi, \quad (2.3.3)$$

ahol

$$H_i = E_i - TS_i + pV_i. \quad (2.3.4)$$

A fentiek segítségével a szupra-vezető állapot entrópiája meghatározható:

$$S_s = -\frac{\partial H_s}{\partial T} = S_n + \frac{H_c}{4\pi} \frac{\partial H_c}{\partial T} \bigg|_p, \quad (2.3.5)$$

a térfogat

$$V_s = \frac{\partial H_s}{\partial p} = V_n - \frac{H_c}{4\pi} \frac{\partial H_c}{\partial p} \bigg|_T. \quad (2.3.6)$$

A kémiai potenciált tartalmazó részre kapjuk, hogy

$$\sum_i \mu_i^s N_i^s = \sum_i \mu_i^n N_i^n - H_c^2/8\pi, \quad (2.3.7)$$

ahol $H_c^2/8\pi$ kondenzációs energia, felírható a szupra-vezető elektronpárok számának és a kötési energia szorzataként (2.2. fejezet). Ennek megfelelően a (2.3.7) egyenleteket az alábbi alakban írjuk át:

$$\sum_{i=3}^n Y_i^{e,s} X_i^s = \sum_{i=1}^{n-1} \mu_i N_i + \mu_n' N_n' + \mu_p N_p = \sum_{i=1}^n \mu_i^s N_i^s. \quad (2.3.8)$$

A jobb oldalon levő első összeg a vezetési elektronokat nem tartalmazó rész, amelyről a kísérleti tapasztalatok alapján fel lehet tételezni, hogy a szupra-normál átmenet során nem változik, a második tag a normál elektronok járuléka, a harmadik tag a szupra-vezető elektronpárok járuléka; olyan kölcsönhatásokban amikor az elektron-szám megmarad $N_n' + 2N_p = N_n = \text{const.}$

A szupra-vezető állapot belső energiája külső mágneses tér hiányában:

$$E_s = TS_s - pV_s + \sum_{i=1}^n \mu_i^s N_i^s. \quad (2.3.9)$$

A külső mágneses tér jelenlétében bevezetendő termodinamikai paramétereket úgy határozzuk meg, hogy az elektromágneses tér energiájában (2.2.5) elvégezzük a termodinamikai átlagolást.

Meissner állapotban a mágneses tér behatolása felületi, ennek megfelelően a belső energiát a (2.3.10) összefüggés adja meg. Kevert állapotban a mágneses tér behatolása fluxusfonalak alakjában történik, a normál minta szuszceptibilitását elhanyagolva:

$$|\int \mathbf{h}(\mathbf{r}) d\mathbf{f}| = \Phi_0 N_v, \quad (2.3.10)$$

ahol Φ_0 az elemi fluxus, N_n a vortexszám. Vezessük be a \mathbf{h}_{v0} teret, amely az adott mintában a fenti vortex-szám (sűrűség) mellett kialakuló mágneses tér ideális vortex-szerkezet esetén. Ezzel az elektromágneses tér energia az alábbi alakban írható:

$$E_{em} = \frac{1}{8\pi} \int \{ \mathbf{h}_{v0}^2 + \lambda^2 (\text{rot } \mathbf{h}_{v0})^2 + (\mathbf{h} - \mathbf{h}_{v0})^2 + \lambda^2 (\text{rot } (\mathbf{h} - \mathbf{h}_{v0}))^2 \}. \quad (2.3.11)$$

A jobb oldalon szereplő első és második tag az ideális vortex-rendszer energiája

$$E_{\text{em, id}} = \frac{1}{8\pi} \int (\mathbf{h}_{v0}^2 + \lambda^2 (\text{rot } \mathbf{h}_{v0})^2) d^3r = \frac{1}{8\pi} \int \left\{ \sum_i H_{c1}(\mathbf{r}) \Phi_0 \cdot \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) + \sum_{i \neq j} U_{ij} \right\} d^3r =$$

$$= \frac{1}{8\pi} \int \left\{ \sum_i (H_{c1}(\mathbf{r}) \Phi_0 + h(\mathbf{r}) \Phi_0) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \right\} d^3r \quad (2.3.12)$$

alakban írható át (pl. [49], ahol U_{ij} a vortex-vortex kölcsönhatást írja le, és \mathbf{h} az i -edik vortex helyén a többi vortex által eredményezett mágneses tér. Vezessük be a vortex számot, amely definíció szerint a következő:

$$N_v = \int \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) d^2r \quad (2.3.13)$$

ezzel a (2.3.13) egyenlet az alábbi alakban írható át (45, 50—54).

$$E_{\text{em, id}} = U_v N_v \quad (2.3.14)$$

ahol $U_v = \frac{H_{c1}(\mathbf{r}) \varphi_0 + \mathbf{h}(r) \varphi_0}{8\pi}$ a vortex potenciál, és a (2.3.14) kifejezések csak ideális minta esetén ekvivalensek, mivel a (2.3.13) egyenlet jobb oldala nem ideális minta esetén helyfüggő lehet (amikor precipitációk, zárványok, határfelületek ... vannak jelen), ez azzal ekvivalens, hogy a vortex képződési energia helyfüggő. Ezt a helyfüggést nem lehet a termodinamikai paraméterek helyfüggésén keresztül leírni, mivel a változások termodinamikai szempontból mikroszkopikusak, azaz a termodinamikai leírásra való áttérést jelentő átlagolás méretén belül.

A fentiek következtében meg kell engedni, hogy többféle vortex potenciál legyen, legyen N_{vi} azon vortexek száma, amelyek U_{vi} vortex potenciállal rendelkeznek, ekkor a (2.3.13) kifejezéssel ekvivalens (termodinamikai szempontból) az alábbi kifejezés

$$E_{\text{em, id}} = \sum_i U_{vi} N_{vi}. \quad (2.3.15)$$

A (2.3.15) kifejezést bizonyos alkalmazások esetén célszerű átírni az alábbi alakba:

$$E_{\text{em, id}} = U_{v0} \cdot N_v + \sum_i E_{vk,i} N_{vi}, \quad (2.3.15)$$

* ahol U_{v0} vortex potenciál az ideális mintában, $U_{vi} - U_{v0} = E_{vk,i}$ a vortex kötési energia (55, 56).

A (2.3.12) egyenlet jobb oldalán levő harmadik tag a lokális mágneses térnek az ideális szerkezettől való eltérésnek járuléka, ez a változás fizikailag a vortexrács deformációján keresztül realizálódik. A vortexrács deformációs energiáját elasztikus vortexrács közelítésben határozzuk meg. A számolás egyszerűsítése érdekében a koordináta rendszert úgy választjuk meg, hogy a perturbálatlan vortexek a z tengellyel párhuzamosak. A vortexrács elmozdulása az \mathbf{r} pontban legyen $\boldsymbol{\beta}(\mathbf{r})$, $\boldsymbol{\beta}(r) = \beta_x(x, y, z)$, $\beta_y(x, y, z)$, 0 mivel a vortex tengellyel párhuzamos elmozdulásának nincs fizikai jelentése. A vortexrács deformációs tenzora

$$\varepsilon_{ik} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial \beta_i}{\partial x_k} + \frac{\partial \beta_k}{\partial x_i} \right\}. \quad (2.3.16)$$

A feszültség tenzor

$$\sigma_{ik} = \sum_{em} C_{ikem} \varepsilon_{em}. \quad (2.3.17)$$

A vortexrács szimmetriáit figyelembe véve a (2.3.17) az alábbi alakra redukálódik.

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_z^v \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xy} \end{bmatrix} \quad (2.3.18)$$

Amikor a vortexeket csak mágneses erővonalaknak tekintjük a C_{66} értéke zérus, azonban ez a közelítés nem megengedhető, mivel a vortexek háromszögrácsot alkotnak, s e rács-szerkezet torzulás is erőhatással jár. (C_{66} értékét *Labusch* [57] és *Brandt* [58] határozták meg.)

A c_{iklm} mátrix többi elemét mágneses erővonal közelítésben lehet meghatározni:

$$\int E_{\text{Def}} d^3x = \int \frac{(\delta \mathbf{h})^2}{8\pi} d^3x \quad (2.3.19)$$

felhasználva, hogy $\delta \mathbf{h} = \text{rot}(\boldsymbol{\beta} \times \mathbf{h})$ (42):

$$C_{11} + C_{12} = 2H \frac{\partial H}{\partial B} \quad (2.3.20)$$

és

$$C_{44} = H \cdot B. \quad (2.3.21)$$

Termodinamikai elvekből következik, hogy

$$C_{11} - C_{12} = 2C_{66}. \quad (2.3.22)$$

A (2.3.12) egyenlet jobb oldalán levő negyedik tag a transzportáramhoz tartozó kinetikus energiát írja le, ennek megfelelően

$$\frac{\lambda^2 \text{rot}}{2} (\mathbf{h} - \mathbf{h}_{v0})^2 = \mathbf{V}_s \mathbf{p}_s, \quad (2.3.23)$$

ahol v_s a transzportban részt vevő elektronok sebessége, \mathbf{p}_s az impulzus. Ezzel a belső energia elektromágneses járuléka:

$$E_{\text{em}} = \Sigma U_{v,i} N_{v,i} + \sigma_{ik} \varepsilon_{ik} + \mathbf{v}_s \mathbf{p}_s. \quad (2.3.24)$$

A szupravezető-állapot belső energiája:

$$E_s = TS_s + pV_s + \sum_{i=1}^{n+1} \mu_i N_i + \sum_i U_{vi} N_{v,i} + \sum_{ik} \sigma_{ik} \varepsilon_{ik} + \mathbf{v}_s \mathbf{p}_s \quad (2.3.25)$$

2.3.2. Fázisátalakulások

Ebben a fejezetben megmutatjuk, hogy a (2.3.25) egyenlettel definiált szupravezető belső energia függvényből Legendre transzformációval nyerhető potenciálok a különböző fázisátalakulások helyét visszaadják.

A szupravezető-kísérleteket általában állandó T , p és H mellett végzik, ennek megfelelően a rendszer állapotát a

$$G = E - TS + pV - BH \quad (2.3.26)$$

Gibbs potenciál minimuma határozza meg, az az állapot valósul meg, amelyben G minimális.

Normál állapot Gibbs potenciálja:

$$G_n = E_n - TS_n + pV_n - \frac{BH}{4\pi} = H_n(H=0) - \frac{H^2}{8\pi}. \quad (2.3.27)$$

A normál-Meissner átmenet feltétele: $G_n = G_s$, azaz $H = H_c$.

Kevert állapot-normál állapot átmenet:

A kevert állapotban a Gibbs potenciál:

$$G_s = H_s + \sum_i \left(U_{v,i} - \frac{H\phi_0}{4\pi} \right) N_{v,i} = \sum_{ik} \sigma_{ik} \varepsilon_{ik} + v_s p_s. \quad (2.3.28)$$

Mivel $H \rightarrow H_{c2}$ esetben a vortex kötési energia zérushoz tart és a vortexrács deformációs tag általában sokkal kisebb, mint a többi a $G_n = G_k$ feltétel $H = H_{c2}$ külső mágneses térben teljesül.

Kevert állapot-Meissner állapot átmenet.

A kevert állapotban a mágnesezettséget a $\frac{\partial G_s}{\partial B} = 0$ feltételből lehet meghatározni, ebből

$$U_0(B) - H + \frac{\sum_i (U_i - U_0) N_k + \sigma_{ik} \varepsilon_{ik}}{B} = 0. \quad (2.3.29)$$

Ennek az egyenletnek több megoldása van, azaz kevert állapotban pinningek jelenlétében a külső feltételek nem határozzák meg a mágnesezettséget, a mágnesezettség függ a rendszer történelmétől, histerézist mutat. Ennek megfelelően a kevert-Meissner átmenet helye is történelemtől függő. Pinningmentes esetben az átalakulás helye

$$U_0(B) - H = 0, \quad H = H_{c1}. \quad (2.3.30)$$

Pinningek jelenléte esetén az

$$\sum_i \left(U_i - \frac{H\phi_0}{4\pi} \right) N_{v,i} + \sum_{ik} \sigma_{ik} \varepsilon_{ik} = 0 \quad (2.3.31)$$

egyenlet megoldása határozza meg az átmenetet.

2.3.3. Stabilitás

A stabilitás-elmélet alapján a stabil rendszerek energiamátrixa pozitív definit. Az alábbiakban megvizsgáljuk, hogy a stabilitási feltétel milyen megszorításokat ad. A normál állapottal történő összehasonlítás megkönnyítésére N_v helyett a mágneses indukciót használjuk.

A szupravezető-állapot belső energia mátrixa:

$$e_{ik} = \frac{\partial^2 E}{\partial X_i \partial X_k}.$$

Az entrópiasűrűséget és a szupravezető elektronpársűrűséget tartalmazó belső energia almátrix:

$$e_{ik} = \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 e}{\partial s^2} & \frac{\partial^2 e}{\partial s \partial n_p} \\ \frac{\partial^2 e}{\partial s \partial n_p} & \frac{\partial^2 e}{\partial n_p^2} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{C_v}{T} & \frac{\partial T}{\partial n_p} \\ \frac{\partial T}{\partial n_p} & \frac{\partial E_k}{\partial n_p} \end{vmatrix}$$

az almátrix pozitív definitásából következik, hogy

$$\frac{\partial E_k}{\partial n_k} > 0 \quad (2.3.33)$$

azaz a kötési energia növekszik a párok sűrűségének növekedésével, és

$$\frac{\partial_k}{\partial n_k} > \frac{\partial T^2}{\partial n_p} \cdot \frac{T}{c_v}. \quad (2.3.34)$$

A vortexszámot tartalmazó almátrix vizsgálatánál az energiamátrix:

$$e_{ik} = \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 e}{\partial s^2} & \frac{\partial^2 e}{\partial B \partial S} \\ \frac{\partial^2 e}{\partial S \partial B} & \frac{\partial^2 e}{\partial B^2} \end{vmatrix}. \quad (2.3.35)$$

A normál állapot energiamátrixa

$$e_{ik}^n = \begin{vmatrix} \frac{1}{TC} & \frac{\partial T}{\partial B} \\ \frac{\partial T}{\partial B} & \frac{1}{1+4\pi\chi} \end{vmatrix}. \quad (2.3.36)$$

A Meissner-állapot energiamátrixa

$$e_{ik}^M = \begin{vmatrix} \frac{1}{TC_s} & 0 \\ 0 & \infty \end{vmatrix}. \quad (2.3.37)$$

Az $e_{BB} = \infty$ azt jelenti, hogy Meissner-állapotban nem lehetséges mágneses fluktuáció; $B=0$. Ebben az állapotban nem kell a mágneses kölcsönhatással számolni, a rendszer viselkedését leíró energiamátrix

$$e_M = e_{ss} = \frac{C_s}{T}. \quad (2.3.38)$$

A kevert állapot energiamátrixa

$$e_{ik}^i = \begin{vmatrix} \frac{C}{T} & \frac{\partial U_v/\varphi_0}{\partial S} \\ \frac{\partial T}{\partial B} & \frac{\partial U_v/\varphi_0}{\partial B} \end{vmatrix}. \quad (2.3.39)$$

A kevert állapot stabilitásából következik, hogy

$$\frac{\partial U_v/\varphi_0}{\partial B} = \left(\frac{1}{\varphi_0}\right)^2 \cdot \frac{\partial U_v}{\partial n_v} > 0 \quad (2.3.40)$$

a belső térnek a vortexszám növekedésével növekednie kell. A másik leszámaztatható egyenlőtlenség a vortexszám hőmérséklet függésére állít korlátot.

2.3.4. Összehasonlítás az irodalommal

1. Az irodalomban általánosan elfogadott leírás az $E=E(S, V, B, N_e)$ belső energiát használja az általunk bevezetett $E=E(S, V, N_p, N_n, N_v, \varepsilon_{ik}, P_s)$ helyett. Mivel az általunk bevezetett extenzív paraméterek függetlenek, kevesebb paraméterrel definiált energiafüggvény nem tartalmazhatja a teljes információt a rendszer állapotáról.

A fázisátalakulások helyét, ideális, pinningmentes mintában visszadja a szokásos leírás, azonban a hiszterézist már nem. A belső transzportfolyamatok tárgyalására nem kielégítő, mivel pl. nem tartalmazza a szupravezető elektronpár-normál gerjesztés rekombinációt.

2. Az $E=E(S, V, M, N_e)$ belső energiafüggvény használata szintén általánosan elterjedt, erre a képre is vonatkoznak a fenti megjegyzések, valamint a belső mátrix mágneses momentumhoz tartozó eleme

$$e_{MM} = \frac{\partial^2 e}{\partial M^2}$$

Meissner állapotban negatív; $e_{MM} = -\frac{1}{4\pi}$ amely termodinamikai szempontból azt jelenti, hogy a rendszer nem stabil. A látszólagos ellentmondásnak az az oka, hogy diamágneses anyagok esetén a mágneses momentum nem tekinthető extenzív paraméternek, nem írható fel mérlegegyenlet [56].

A fenti problémát Bazarov is észrevette [59], azonban a megoldása inkonzisztens, javasolta, hogy az abszolút értékkel kell számolni, ekkor $dU = TdS - pdv - HdM$, de ekkor is $e_{MM} = -\partial H/\partial M < 0$.

2.4. A szupravezetőkben lejátszódó transzportfolyamatok termodinamikai tárgyalása

Az 1. fejezetben ismertetett termodinamikai transzport-elmélet alapján a lineáris termodinamika érvényességi tartományba eső nem egyensúlyi állapotokban az áramok és az erők között a vezetési egyenlet teremt kapcsolatot

$$\mathbf{J}_i = L_{ik} \mathbf{Y}_k; \quad (2.4.1)$$

ahol a vezetési mátrixelemek függetlenek az Y_k -től. Egy rendszer transzport folyamatainak leírásához a vezetési mátrix elemeit kell meghatározni.

2.4.1. Branch imbalance relaxáció

A szupravezető elektronpárok és a normál elektronok „kémiai” kölcsönhatása (ezt a szót alkalmazzuk annak kifejezésére, hogy egymásba átalakulhatnak) következtében egyensúlyi állapotban $\mu_p = 2\mu_n$. A lineáris tartományba eső zavarok esetén

$$2 \frac{dN_p}{dt} = -\frac{dN_n}{dt} = 2J_p = 2L_{pp} \cdot (\mu_p - \mu_{p0}) \quad (2.4.2)$$

és

$$\mu_p - \mu_{p0} = \frac{\partial^2 s}{\partial N_p^2} \cdot (N_p - N_{p0})$$

ezzel

$$\frac{dN_p}{dt} = -L_{pp} s_{pp} (N_p - N_{p0}), \quad (2.4.3)$$

ahol T_p a relaxációs idő. Ez a folyamat megfigyelhető, ha a gerjesztési spektrum $k < k_f$ és $k > k_f$ ágaiban a gerjesztési populáció különböző (pl. [60]).

A (2.4.2) egyenlet lokális egyenlet, elemi cellánként írja le az elektron-rendszer viselkedését, véges méretű minta esetén a környezettel való kölcsönhatás az áram divergenciáján keresztül jelentkezik:

$$\frac{dN_p}{dt} = -L_{pp} g_{pp} (N_p - N_{p0}) + \text{div} \mathbf{j}. \quad (2.4.4)$$

2.4.2. Ideális flux-flow

A II. típusú szupravezetők kevert állapotában transzportáram hatására a vortexek mozgásba jönnek, ezt az állapotot flux-flow állapotnak nevezzük. A flux-flow állapot leírására az irreverzibilis termodinamikai megközelítés széles körben elterjedt (pl. [61]). A végtelen vezetőképesség következtében termodinamikai folyamatokban $\nabla\mu=0$, így a termodinamikai erők flux-flow állapotban a hőmérséklet gradiens és a vortex potenciál gradiensé. Válasszuk a koordináta-rendszert úgy, hogy a z tengely külső mágneses tér irányával legyen párhuzamos, ekkor $\text{grad}_z U_v=0$, $J_{v,z}=0$, a

vortex tengelyével párhuzamosan nem szállít entrópiát. A fenti feltételezésekkel az áramok és az erők közötti kapcsolat az alábbi alakban írható fel:

$$\begin{bmatrix} J_{v,x} \\ J_{s,x} \\ J_{v,y} \\ J_{s,y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_{11} & L_{12} & L_{13} & L_{14} \\ L_{21} & L_{22} & L_{23} & L_{24} \\ L_{31} & L_{32} & L_{11} & L_{34} \\ L_{41} & L_{42} & L_{43} & L_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \nabla_x U_v \\ \nabla_x T \\ \nabla_y U_v \\ \nabla_x T \end{bmatrix} \quad (2.4.5)$$

A flux-flow áramlást jól leíró sűrűlódásos konvektív vortex áramlás modell segítségével a vortex-sebesség és a mozgatóerő között az alábbi reláció írható fel:

$$\eta \mathbf{V}_v = \nabla U_v. \quad (2.4.6)$$

A sűrűlódási együtthatóra további megszorítást nyerhetünk, ha meghatározzuk a transportáram és az indukáló elektromos térerősség (E) kapcsolatát. A \mathbf{v} sebességgel mozgó vortex (Φ_0 mágneses dipólus) által indukált térerősség

$$\mathbf{E} = \frac{\mathbf{v} \times \Phi_0}{c} = \frac{(\Phi_0 \times \mathbf{J}) \times \varphi_0}{\eta c} = \frac{\varphi_0^2}{\eta c^2} \cdot \mathbf{J} \quad (2.4.7)$$

n darab mozgó vortex által indukált tér

$$\mathbf{E} = \frac{n\varphi_0^2}{\eta c^2} \mathbf{J} = \frac{\varphi_0 B}{\eta c^2} \cdot \mathbf{J}. \quad (2.4.8)$$

Feltételezve, hogy η független a B -tól, és a fajlagos ellenállás H_{c2} térnél folytonosan változik, kapjuk, hogy

$$\frac{\varphi_0 B}{\eta c^2} = \varrho_n \cdot \frac{B}{H_{c2}}, \quad (2.4.9)$$

ahol ϱ_n a fajlagos ellenállás normál állapotban. Ennek alapján L_{11} értéke:

$$L_{11} = \frac{\varrho_n c^2 \cdot B}{\Phi_0 H_{c2}} \quad (2.4.10)$$

$L_{12} = L_{11} s^+$, s^+ a vortex által szállított entrópia. Termikus gradiens hatására a vortexre ható erőt abból a feltételből lehet meghatározni, hogy az egyes vortexekhez entrópia rendelhető, és ez a vortex-szel együtt mozog [62]. *Maki* [63] kiszámította s^+ értékét

$$s^+ = \varphi_0^2 k^2 T / 24 \cdot \lambda^2 \cdot E_k^2 \quad (2.4.11)$$

$L_{13} = L_{11}$, a Hall-szög, $L_{22} = K_H / T$ a hővezetőképesség, $L_{23} = -L_{11} s^+$, $L_{24} = L_{11} s^+$.

Kereszteffektusok: A normál fémekben fellépő kereszteffektusok analogonjait a flux-flow állapotban is mérni lehet. J_v vortex-áram $\mathbf{E} = \frac{\Phi \times \mathbf{J}_v}{c}$ elektromos teret kelt. A j_x elektromos áram y irányú hőmérséklet gradiens eredményez, ennek megfelelően transzverzális Nernst—Ettinghausen effektus ($dT/dx \neq 0$, $j_{tr} = 0$, $E_y = 0$) és Ettinghausen effektus ($j_{tr} \neq 0$, $J_{q,y} \neq 0$, $dT/dy = 0$) figyelhető meg. (Pl. [61], *Kiss et. al.*, [64—66]). A Hall effektus következtében a vortexek nem merőlegesen mozognak a transport áramra, ennek következtében megjelenik a termoelektromos erő, a Peltier effektus és a Thomson effektus. (Pl. *Kim és Stephen* [67].)

2.4.3. Nem ideális flux-flow

A mintában levő inhomogenitások, precipitációk, diszlokációk ... hatására a vortex képződési energia helyfüggő lehet, ennek megfelelően a vortex elmozdulást gátló „pinning-erők” léphetnek fel, ezért egy, a mintára jellemző kritikus áram érték alatti áramok esetén a vortex mozgás nem indul meg. Azt az állapotot, amelyben maximális disszipáció mentes áram folyik kritikus állapotnak nevezzük. A kritikus állapot részletes tárgyalását a 3. fejezetben ismertetjük, ebben a fejezetben azt vizsgáljuk meg, hogyan kell a vezetési egyenletet módosítani pinningek jelenlétében.

A szupravezető minta belső energiája pinningek jelenléte esetén a (2.3.25) egyenlettel írható le. Ahhoz, hogy a vortex elmozduljon, a kötött állapotnak meg kell szűnnie.

A vortex-rendszer egyensúlyi feltételét a $\frac{\delta G}{\delta x} = 0$ feltételből lehet meghatározni, azaz egyensúlyi állapotban:

$$\frac{\delta U}{\delta x_i} = \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}. \quad (2.4.12)$$

A $\frac{\delta U}{\delta x}$ a pinning-centrumok által kifejtett erőt írja le, amelyet úgy lehet modellezni, hogy a rögzített vortex minden $\delta \mathbf{r}$ infinitezimális elmozdulásával szemben fellép egy $-f \frac{\delta \mathbf{r}}{|\delta \mathbf{r}|}$ erő, ahol $0 \leq f \leq F_p$ (ahol F_p az adott pinning-centrum maximális kötőereje.) A második tag részletesen kiírva

$$\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} = \left\{ \frac{\mathbf{J} \times \Phi_0}{c} + C_{66} \left\{ \frac{\partial^2 \boldsymbol{\beta}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \boldsymbol{\beta}}{\partial y^2} \right\} \right\}_i. \quad (2.4.13)$$

A kritikus állapot egyenlete (56):

$$\mathbf{F}_{\text{peff}} + \frac{\mathbf{i} \times \Phi_0}{c} + C_{66} \left\{ \frac{\partial^2 \boldsymbol{\beta}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \boldsymbol{\beta}}{\partial y^2} \right\} = 0. \quad (2.4.14)$$

A (2.4.14) kritikus állapot egyenlet eltér az irodalomban használt kritikus állapot egyenlettől (pl. [61, 68]), mivel ez tartalmazza a vortexrács torzulásából származó erőhatásokat is.

A (2.4.14) egyenlet megoldása nagyon bonyolult feladat, mivel az effektív pinning erő függ a vortexek helyzetétől. Az effektív pinning erő kiszámításával a 3. fejezetben foglalkozunk.

A (2.4.12) és a (2.4.14) egyenletekből $I > I_c$ esetén a vortexekre ható erő (mozgató erő):

$$F_{\text{mozg}} = \Phi_0 (J - J_c). \quad (2.4.15)$$

A nem ideális flux-flow állapot meghatározásához a (2.4.15) lesz a vortexekre ható termodinamikai erő.

2.4.4. Flux-flow kis GL paraméterű szupravezetőkben

Kis GL paraméterű mintáknál a kritikus állapot közelében a feszültség-áram karakterisztikán egy nemlineáris szakasz figyelhető meg, amely az áram további növelésével lineáris vezetésbe megy át [69–74].

Ez a nonlinearitás megmagyarázható azzal a feltételezéssel, hogy a pinning hatás következtében a vortexeknek csak egy része mozoghat. A modell alkalmazhatóságának feltétele az, hogy a pinning-vortex kölcsönhatás erősebb legyen, mint a vortex-vortex kölcsönhatás erőssége. Ez a feltétel kis tereknél, kis GL paraméterű anyagoknál és vékony filmeknél teljesülhet, ekkor a vortex inkább folyadék, mint kristály. Ilyen olvadt kristályrácsot *Essmann* és *Trauble* [75] megfigyeltek.

A vortex-vortex kölcsönhatás teljes elhanyagolásával, Gauss eloszlású pinning erősséggel *Krasnov et al.* meghatározták a feszültség-áram karakterisztika görbült szakaszát [73]. Feltételezték, hogy a I kritikus áramnak megfelelő kötésű vortexek valószínűség sűrűsége

$$f(I) = \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \frac{\exp\{-(I-a)^2/2\sigma^2\}}{\lambda + \varphi(a/\sigma)} \quad (2.4.16)$$

az $f(I)$ -ben szereplő paramétereket a kísérleti $U-I$ görbékhez történő fitteléssel határozták meg, az

$$U = R_n \int_0^I (I - I_p) f(I_p) dI_p \quad (2.4.17)$$

feszültség-áram összefüggés alapján.

Célunk annak meghatározása, hogy a vortex-vortex kölcsönhatás, hogyan befolyásolja az $U-I$ karakterisztikát, és mi a feltétele annak, hogy a nem-lineáris flux-flow fellépjen [71].

J transzport áram esetén az F_{pi} pinning erővel rögzített vortexre ható eredője F_i .

$$\mathbf{F}_{i\beta} = \frac{\mathbf{j} \times \boldsymbol{\varphi}_0}{c} + \sum_{k,\alpha} \mathbf{F}_{i\beta,k\alpha} + \mathbf{F}_{pi}, \quad (2.4.18)$$

ahol az első tag a transzportáram hatására fellépő Lorentz erő, a második tag a vortex-vortex kölcsönhatás, ahol $\beta=1, \dots, n_k$, n_k az F_{pk} erővel rögzített vortexek száma. A flux-bundle feltételt az azonos F_p , erővel rögzített vortexekre alkalmazva, azt kapjuk, hogy az i -edik vortexcsoporthoz akkor indul el, amikor

$$F_i = 0 = \sum_{\beta=1}^{n_i} \sum_{\alpha=1}^{n_k} \frac{i \times \varphi_0}{c} + \sum_k \mathbf{F}_{i\alpha,k\beta} + \mathbf{F}_{pi} \quad (2.4.19)$$

a $\sum_{k\beta\alpha} \mathbf{F}_{i\beta,k\alpha}$ meghatározásához bevezetjük az átlagos vortex-vortex kölcsönhatás erősségét, f , és feltételezzük, hogy a még rögzített vortexek az elmozdulással szemben fejtenek ki erőt, míg a már mozgó vortexek az elmozdulás irányával megegyező irányú erőt fejtenek ki, ezzel

$$\sum_{k\beta} \mathbf{F}_{i\beta,k\alpha} = \left\{ \sum_{k>i} n_k - \sum_{k<i} n_k \right\} n_i \cdot \mathbf{f} = \left\{ N - 2 \sum_{k<i} n_k \right\} \cdot n_i \cdot \mathbf{f}, \quad (2.4.20)$$

ahol N a teljes vortexszám. (Felhasználtuk, hogy $i > k$ esetén $F_{pi} > F_{pk}$.) Azt az áramértéket, amikor a legelső csoport elindul minimális kritikus áramnak nevezzük $I_{c, \min}$, értéke:

$$I_{c, \min} = F_{p, \min} + (N - n_{\min})f \quad (2.4.21)$$

azt az áram értéket, ahol az összes vortex mozgásba jön maximális kritikus áramnak nevezzük (ettől a ponttól kezdve az $U-I$ karakterisztika lineáris). Az $I_{c, \max}$ értéke:

$$I_{c, \max} = F_{p, \max} - (N - n_{\max})f. \quad (2.4.22)$$

A definícióból következik, hogy $I_{c, \max} - I_{c, \min} \geq 0$, azaz

$$F_{p, \max} - F_{p, \min} - (2N - (n_{\max} + n_{\min}))f > 0. \quad (2.4.23)$$

A görbült $U-I$ karakterisztika megjelenésének feltétele:

$$F_{p, \max} > N \cdot f \quad (2.4.24)$$

azaz a pinning erőnek nagyobbak kell lenni, mint a vortex-vortex kölcsönhatási erőnek.

Az $U-I$ karakterisztika megoldásához meg kell határozni a pinnerő eloszlást $\varphi(F_p)$, ennek ismeretében a 2.4.19. egyenlet megoldásával az adott I áram mellett mozgó vortexek száma $n(I)$ meghatározható, és

$$U(I) = \frac{Q_n}{H_{c2}} \int n(I) dI. \quad (2.4.25)$$

A megoldást diszkrét esetre szemléltetjük, amikor is csak egyféle pinning van, a rögzítetlen pinningek sűrűsége n_{sz} , a rögzítetteké n_r , azok

$$n(F_p = 0) = n_{sz} \text{ és } n(F_p = F_{p0}) = n_r, \text{ ekkor}$$

$$I_{c1} = n_r \cdot f, \quad (2.4.26)$$

$$I_{c2} = F_{p0} - n_{sz} \cdot f \quad (2.4.27)$$

és

$$U(I) = \frac{R_n \Phi_0}{B_{c2}} \cdot \{(I - I_{c1})n_{sz} + (I - I_{c2})n_r\}. \quad (2.4.28)$$

A fenti eredmények összhangban állnak *Kirschner et al.* In—Bi végzett kísérleteinek eredményeivel [72].

III. KRITIKUS ÁLLAPOT

Ebben a fejezetben a disszipatív vortex áramlás megjelenésének feltételét vizsgáljuk.

Azt az állapotot, amelyben a II. típusú szupravezetőben a maximális disszipáció mentes transzportáram folyik kritikus állapotnak nevezzük, ezt a fogalmat *Bean* [76, 77] vezette be. A kritikus állapot egyenletét a 2.4. fejezetben meghatároztuk:

$$\mathbf{F}_{\text{peff}} + \frac{\mathbf{j} \times \varphi_0}{c} + C_{66} \left\{ \frac{\partial^2 \beta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \beta}{\partial y^2} \right\} = 0 \quad (2.4.14)$$

azonban annak következtében, hogy az effektív pinning erő nem egyezik meg a maximális egyedi pinningerők összegével, az egyedi pinningek ismerete még nem teszi lehetővé a kritikus áram meghatározását. Célunk az effektív (eredő) pinning-erő, azaz a kritikus áram meghatározására alkalmas összegzési modell kidolgozása.

A 3.1. fejezetben irodalmi áttekintést adunk a különböző pinning mechanizmusokról, és a hozzá tartozó egyedi pinning erő számításokról.

A 3.2. fejezetben az effektív pinning erő számítására adott modellek kritikai áttekintését adjuk meg.

A 3.3. fejezetben egy új eljárást dolgoztunk ki az effektív pinning erő meghatározására, amely mentes az irodalomban található modellek ellentmondásaitól.

Az elméleti modellt a mérési eredményekkel a 3.4. fejezetben hasonlítottuk össze.

3.1. Egyedi pinning típusok és pinning erő számítások

A pinning centrum és egy vortex kölcsönhatását vizsgáljuk, a legfontosabb kölcsönhatási típusok a vortex-törzs-pinning centrum-, a mágneses- és a rugalmas kölcsönhatások.

3.1.1. Vortex-törzs-pinning centrum kölcsönhatás

A vortex-képződés $\sim \xi$ sugarú normál tartomány kialakulásával modellezhető, azaz $2\pi\xi^2 \cdot L \cdot H_0^2/8\pi$ kondenzációs energia növekedéssel, ahol L a vortex hossza. Normál tartomány kialakulása esetén ez az energianövekedés az alábbiaknak megfelelően történik:

a) A szemcse gömb alakú, és átmérője (d) kisebb, mint ξ ekkor

$$U = \frac{H_c^2}{8\pi} \frac{4\pi}{3} \left(\frac{d}{2}\right)^3. \quad (3.1)$$

A maximális erő

$$F_{\max} = \frac{H_c^2}{8\pi} \frac{4\pi}{3} \left(\frac{d}{2}\right)^2 \frac{1}{\xi} \sim \frac{H_{c2}^{5/2}}{\sqrt{\varphi_0} \kappa^2} d^3 \quad (3.2)$$

Nb₅₀Ti₅₀ ötvözet adatait használva $F_{\max} \sim 10^{-14} \text{ N}$ (78).

Ez a számítás valószínűleg túlbecsüli a pinning erőt (H_c precipitátum sem szűkszerűen zérus, proximiti effektus stb.).

b) A szemcseméret nagyobb, mint a vortex-törzsméret, akkor

$$U \sim \frac{H_c^2}{8\pi} \pi \xi^2 L \quad (3.3)$$

ugyancsak Nb₅₀Ti₅₀ ötvözetre számítva az egységnyi vortexhosszra jutó pinning erő (44):

$$\frac{F}{L} = \frac{U_v}{\xi} = \sqrt{\frac{\varphi_0}{2}} \frac{H_{c2}^{3/2}}{K^2} \sim 2 \cdot 10^{-4} \text{ N/m}. \quad (3.4)$$

3.1.2. Mágneses kölcsönhatás

A vortex tér- és árameloszlását megváltoztató inhomogenitások helyfüggő szabadenergiát eredményeznek, azaz pinninghatás léphet fel.

A legegyszerűbb eset a szupravezetőt a szigetelőtől elválasztó sima határfelület, amely párhuzamos a vortexekkel, ekkor az I_s felületi áram következtében taszító erő lép fel,

$$I_s = 4\pi \frac{(H-B)}{\lambda} e^{-x/\lambda} = \frac{4\pi M_{\text{rev}}}{\lambda} e^{-x/\lambda} \quad (3.5)$$

a Lorentz-erő

$$F_L = \frac{4\pi\varphi_0 M_{\text{rev}}}{\lambda} e^{-x/\lambda}. \quad (3.6)$$

A másik egy vonzó kölcsönhatás, amely a „tükörkép” vortex hatására lép fel (a határfeltételek modellezhetők ezzel). London közelítésben várható, hogy az erő $De^{-2x/\lambda}$ alakban függ a helytől. A D értékét Campbell és Evetts [61] számolta ki, abból a feltételből, hogy termodinamikai egyensúlyban $x=0$ -ból, $x=\infty$ -be vinni egy vortexet zérus munkavégzést jelent, azaz

$$\int_0^\infty \left\{ \frac{4\pi\varphi_0 M_{\text{rev}}}{\lambda} e^{-x/\lambda} - De^{-2x/\lambda} \right\} dx = 0. \quad (3.7)$$

Ebből az egységnyi vortexre ható eredő erő az $x=0$ pontban:

$$\frac{F}{L} = -\frac{4\pi\varphi_0 M_{\text{rev}}}{\lambda} \quad (3.8)$$

Nb₅₀Ti₅₀ ötvözet adatait használva $F/L \sim 10^{-5}$ N/m.

3.1.3. Rugalmas kölcsönhatás

A rugalmas kölcsönhatás alapja az, hogy szupravezető állapotban a normálhoz képest kisebb a fajtérfogat és nagyobb a rugalmas modulus (a változás tipikus értéke $\varepsilon_{v0} \sim 10^{-7}$ Brandli [79], ill. $\Delta S/S \sim 10^{-4}$ Alers és Waldorf [80].

a) Parelasztikus kölcsönhatás

A vortex-mag körül kialakuló feszültségtér kölcsönhat az anyag—hiba feszültségtérével. A parelasztikus kölcsönhatási energia [81].

$$\delta U_{ep} = \int U_{ij}^d \sigma_{ij}^v d^3x, \quad (3.9)$$

ahol U_{ij}^d a rácshiba deformáció tenzora, σ_{ij}^v a vortexrács rugalmas feszültség tenzora. Kramer és Braun [82] becslést adtak a kölcsönhatásra a vortex és egy párhuzamos éldiszlokáció kölcsönhatása esetén:

$$\frac{F}{L} \sim 5 \cdot 10^{-7} \text{ N/m} \quad (3.10)$$

b) Dielasztikus kölcsönhatás

A rácshiba rugalmas sajátenergiája függ a rácskörnyezet rugalmas állandójától, ennek alapján különbség van a „merev” vortexmágban és a „lágys” szupravezetőben kialakuló hiba között.

$$\delta U_{ed}^{\max} = \delta U_{cp} \frac{d\mu}{\mu}, \quad (3.11)$$

ahol μ a nyírási modulus, $\delta\mu$ a nyírási modulus különbség a normál és a szupravezető állapot között [83], *Webb* becslése alapján $f/L \sim 5 \cdot 10^{-6}$ N/m [84].

3.1.4. Becslések a GL-elmélet alapján

A GL-elmélet nagy kappájú anyagok esetén használható. A szabad energia-változás mérhető mennyiségekkel (H_{c2} , K) kifejezve:

$$\delta U = \int \left\{ \frac{H_c^2}{8\pi} - \frac{\delta H_c^2}{H_{c2}} \left| \frac{\psi}{\psi_0} \right|^2 + \frac{1}{2} \frac{(\delta K)^2}{K^2} \left| \frac{\psi}{\psi_0} \right|^4 \right\} d^3x \quad (3.12)$$

(a rugalmas kölcsönhatást elhanyagoltuk).

Campbell és *Evetts* [61] az alábbi formulát kapták az energiára:

$$U_0 = \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{\sqrt{3}}{8\pi\varphi_0}} \frac{H_{c2}^{5/2}}{K^2} \frac{H_{c2}}{H_{c2}} L^3 b(1-b). \quad (3.13)$$

3.2. Az effektív pinningerő meghatározása (a pinningerők összegzése)

A pinning erők algebrai összege általában nem egyezik meg az effektív pinningerővel, *Webb* [84] megmutatta, hogy a makroszkopikusan mért pinningerő több, mint egy nagyságrenddel kisebb, mint az algebrai összegzéssel nyert érték. *Yamafuji* és *Irie* [85] megmutatták, hogy ez megmagyarázható a rácsmerevség figyelembevételével. A kísérleti eredmények is igazolják, hogy a fluxusrács rugalmas tulajdonságai is szerepet játszanak a pinning hatás létrejöttében. *Labusch* [86] a véletlen eloszlású pinning centrumok effektív hatásának meghatározására dolgozott ki egy statisztikus módszert. A fenti modellek visszatükrözik azt, hogy az effektív pinningerő függ a vortexrács rugalmas tulajdonságaitól, azonban a modellek által jósolt és a kísérletileg meghatározott egyedi pinning erő—effektív pinning erő kapcsolatok között nagymértékű eltérés található.

A pinningerők összegzésénél használt általánosan elfogadott közelítő feltételek: [87].

1. A pinning centrumok kicsik, egymástól nagy távolságra helyezkednek el.
2. A pinningerők potenciálból származtathatók és a pinningerő távolsági függése oly erős, hogy ez helyi instabilitást eredményezhet (küszöbérték kritérium), ill. a maximális pinningerőnek nagyobbannak kell lennie egy küszöbértéknél ahhoz, hogy a kritikus áram zérustól különböző legyen.
3. A transzportáram homogén eloszlású a mintában.
4. A pinningcentrumok véletlenszerű eloszlásúak.
5. A vortexrács rugalmas kontinuumként kezelhető.
6. Termikus aktiváció elhanyagolható.

A fenti feltételezések alapján Labusch az alábbi egyenletet írta fel (86):

$$D_2 \beta(\mathbf{r}) - \sum_i U(\mathbf{r} + \beta(\mathbf{r}) - \mathbf{R}_i) + \mathbf{P} = 0, \quad (3.14)$$

ahol $\beta(\mathbf{r})$ az elmozdulás vektor az egyensúlyi vortex helyzettől mérve; D_2 differenciál operátor a 2.4.12. kifejezés jobb oldalának rövidített felírása; $U(\mathbf{r})$ pinning-vortex kölcsönhatási potenciál; \mathbf{p} az $x-y$ síkban folyó homogén áram hatását leíró erő. A kölcsönhatási potenciált az alábbi alakkal közelítette:

$$U = U_0 \left(1 - \frac{2}{3} \frac{\beta^2}{d^2} + \frac{1}{9} \frac{\beta^4}{d^4} \right) \quad (\beta/d) < 3 \quad (3.15)$$

$$U = 0 \quad (\beta/d) > 3$$

A (3.14) egyenlet közelítő megoldásával a

$$F_{\text{eff}} = \frac{N_p \cdot L \cdot K_0^2 G'(0)}{2} \quad (3.16)$$

érték adódik a kritikus erőre, ahol gyenge pinning esetén:

$$G'(0) = \frac{1}{4\pi} \sqrt{\frac{B}{\varphi_0}} \left\{ \frac{1}{C_{44} C_{11}} + \frac{1}{C_{44} C_{66}} \right\} \quad (3.17)$$

és N_p a hibasűrűség, L a szemcseméret y irányban. A (3.16) kifejezés csak akkor igaz, ha $K_0 > \frac{8d}{3G}$; $K_0 < \frac{2d}{3G}$ esetben P_c értéke zérus, azaz nincs pinninghatás.

Campbell [87] egydimenziós modell alapján számolt, a felsorolt (1–6) feltételek mellett az effektív pinning erőre az

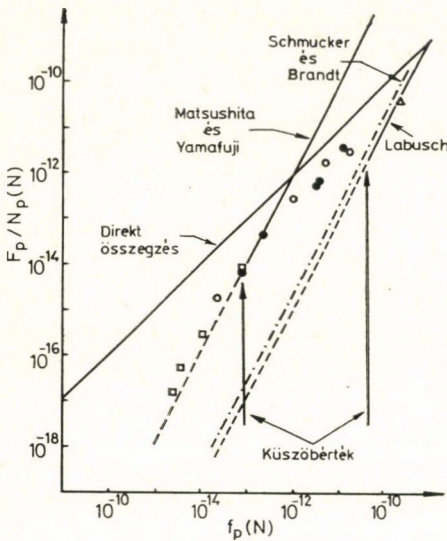
$$F_{\text{eff}} = B J_c = N_p \frac{(K-1)}{K+1} \quad (3.18)$$

eredményt kapta, ahol N a pinningsűrűség, $K = K_0 G'/d$. A pinningerők összegzésére kidolgozott statisztikus modellek alapján az effektív pinning-erő zérus, ha $K < 1$, azaz amikor a pinning-potenciál erőállandója kisebb, mint a vortexrács deformációs-erőállandója, ezt a feltételt küszöbérték kritériumnak nevezzük, e szerint zérustól különböző kritikus áram csak akkor létezhet, ha az egyedi pinningerő meghalad egy, a vortexrács rugalmas paramétereitől függő értéket. A dinamikus pinning modellek (Yamafuji [89]) szintén küszöbérték kritériumot eredményeznek, azonban a kísérleti eredmények nem mutatják a küszöbérték kritériumot.

S. Takács [90] kiszámította az effektív pinningerőt különböző vortex-pinning kölcsönhatási potenciálokra, és megmutatta, hogy a küszöbérték-probléma nem küszöbölhető ki a potenciál ahhoz megfelelő megválasztásával.

Besugárzott Nb minták esetén mért effektív pinningerőket az egyedi pinningerők függvényében a 3.1. ábrán mutatjuk be, feltüntetve a különböző modellek alapján számított görbék is.

Az ábrán a négyzetek a diszlokáció hurkok eredményei (Agrawal et al. [90]), a karikák a magas hőmérsékleten adják meg (Koch et al. [91, 92]), a fekete körök a magas hőmérsékleten történt Ni^+ bombázással nyert üregek pinning hatását adják meg



3.1. ábra. Az egy pinning centrumra jutó effektív pinningerő az egyedi pinningerő függvényében Nb minták esetén, $b=0,55$ és $T=4,2$ K

nem létezik, amikor a pinningerők potenciálból származtathatók, ennek következtében a küszöbérték-probléma is eltűnik, azonban nem tudta megjósolni az $F_p - f_p$ kapcsolatot.

Gyenge pinning határesetben Larkin és Ovchinnikov [98] megadták a pinningerők korrekt összegzését. Statisztikusan összegezte N pinningerőt a V koherencia térfogatban. Az eredmény:

$$F_p = N^2 f_p^4 / 500 C_{44} C_{66}^2 \xi^2. \quad (3.19)$$

Kooperatív pinninghatás feltételezésével az n_p pinning effektív pinning ereje

$$F_{pt} = \frac{g^2 N_p F_p^2}{C_{eff}} \quad (3.21)$$

$g=9,85$ választásával a küszöbérték $8 \times 10^{-14} N$, a görbe extrapolálása alacsonyabb p értékekre a kísérleti eredményekkel jól megegyező eredményt ad, azonban nem szünteti meg a küszöb problémát, és nem ad magyarázatot arra, hogy a négyzetes függés miért megy át lineáris kapcsolatba, valamint $F_p > \frac{C_{eff}}{g^2}$ esetben fizikailag értelmetlen eredményt ad, mivel az $F_{pt} \leq N_p \cdot F_p$.

A modellek közös jellemzője, hogy a pinningerőkre alsó korlát létezik, Campbell esetén $K=1$; Labusch esetén $K \sim 1$ az a határ, amely alatt nincs effektív pinning hatás. A különböző K értékekre vonatkozó fizikai megfontolásokat Campbell (1978) összegezte:

(Freyhardt, [83]), a háromszög (Lippman et al. [93]) eredménye a Nb mátrixban levő nagy méretű Nb₂N precipitátumok esetén, a fekete háromszög Rollins eredménye protonnal besugárzott Nb mintákon (diszlokációs hurkok [94]).

Az 1. görbe a közvetlen összegzéssel kapott effektív pinningerő (Dew-Hughes, [95]). A 2. görbe a Labusch [57] által kiszámított görbe, a küszöbértékkel, a 3. görbe a Labusch által számított eredmény extrapolálva olyan értékekre, ahol a küszöbérték kritérium következtében pinninghatás nem léphet fel, 3/a. görbe a Labusch-elmélet Schmucker és Brandt [96] által kiszámított fluxusrács rugalmas állandókkal; a 4. görbét Matsushita és Yamafuji [89] számították (a küszöbértéket bejelöltük).

A 3.1. ábráról leolvasható, hogy ellentmondás van az elméletek és a kísérleti eredmények között. Az ellentmondás feloldására több javaslat is született, ezek közül néhányat ismertetünk. Brandt [97] megmutatta, hogy a híg pinning határeset

	Mellette	Ellene
$K < 1$	pinningerő számítások ezt jósolják	nincs effektív pinning a számítások alapján skála törvény nem teljesül
$1 < K < 10$	az áram-behatolási mélység- mérések ezt jósolják	
$K > 10$	teljesül a skála törvény	nincs olyan pinning mechanizmus amely ilyen erőt biztosítana rugalmas deformáció lehetetlen
$K > 3$		

3.3. Az effektív pinningerő

A pinningerők összegzésénél használt 1—6. feltételezés közül a 2. feltételezést (a pinningerők potenciálból származtathatóak) nem igazolták, illetve az irodalomban kontraindikációval találkozhatunk. *Campbell* [100] megmutatta, hogy amikor a pinningerők potenciálból származtathatóak, az eredmény független C_{66} -tól; ez ellentmond a kísérleti eredményeknek. *Brandt* [101] megmutatta, hogy bizonyos esetekben (pl. amikor a szupravezető paraméterek gyorsan változnak a fluxus távolságon belül) a vortex-pinning kölcsönhatás nem írható le potenciállal.

A potenciál probléma másik vetülete az, hogy a küszöbérték kritérium (amelyet kísérletek nem igazolnak) a potenciál feltételezéséből származik, mivel a fluxus-rács teljes energiája (E_t) a pinning potenciális energia (E_p) és a fluxus-rács deformációs energia (E_{def}) összegeként állítható elő, azaz

$$E_t = E_{\text{Def}} + E_p = C(x - x_0)^2/2 - KCx^2/2, \quad (3.22)$$

ahol C a rugalmassági modulus; KC a pinning potenciál erőállandója, a pinning-centrum $x=0$ -ban van, a vortex kiinduló helyzete $x=x_0$.

A stabilitás feltétele:

$$\frac{\partial^2 E_t}{\partial x^2} < 0. \quad (3.23)$$

A rendszer stabil (azaz tetszőleges x_0 vortexhelyzet stabil), ha $K < 1$. Pinninghatás csak $K > 1$ esetében léphet fel. A pinning vortex kölcsönhatási potenciál létezése helyett feltételezzük, hogy a kölcsönhatás nyugalmi súrlódási típusú erővel írható le, azaz: a fentiek alapján a 6. feltételt az alábbiak szerint módosíthatjuk [102].

6. *Feltétel:* Amikor a pinning-vortex távolság kisebb, mint δ a vortex minden infinitenzimális elmozdulásával szemben fellép egy pinning erő, amely ellentétes az elmozdulás irányával, és maximális értéke F_p .

Feladatunk azon maximális mozgató erő meghatározása, amely mellett a vortex-rendszer még egyensúlyban van, azaz a rögzített vortexekre ható erők eredője zérus. Egy rögzített vortexre ható erő:

$$\mathbf{F}_{\text{tot}} = \mathbf{F}_{\text{Dr}} + \mathbf{F}_{\text{Def}} + \mathbf{F}_p, \quad (3.34)$$

ahol F_{Dr} a mozgatóerő, $\mathbf{F}_{\text{Dr}} = \mathbf{J} \times \boldsymbol{\Phi}_0$; \mathbf{F}_{Def} a fluxusrács deformációból származó erő, \mathbf{U} elmozdulás esetén

$$\mathbf{F}_{\text{Def}} = A \cdot \mathbf{u}, \quad (3.25)$$

ahol A a rugalmas erőállandó.

A (3.24) egyenlet vizsgálatához feltesszük, hogy B párhuzamos a z tengellyel, J az y tengellyel és így \mathbf{F}_{Dr} x irányú, ekkor a kooperatív pinning hatás elhanyagolásával \mathbf{F}_{Def} -nek a pinning centrum helyén a vortex iránnyal párhuzamos komponense se lehet, így a kritikus állapot feltétele

$$F_{Dr} + F_{Def,x} + F_{p,x} = 0, \quad (3.26)$$

$$F_{Def,y} + F_{p,y} = 0 \quad (3.27)$$

ebből

$$F_{Dr} = F_{Def,x} + \sqrt{F_p^2 - F_{Def,y}^2}. \quad (3.28)$$

A (3.28) egyenlet egy pinning centrumra érvényes, a „fluxbundle” feltételezés felhasználásával (Anderson, 1964) az egyenlet kiintegrálható.

$$\mathbf{J} \times \mathbf{B} = \frac{\int \mathbf{F}_{Dr} d^3 r}{\int d^3 r} \frac{\int (F_{Def,x} + \sqrt{F_p^2 - F_{Def,y}^2}) N_{pe} d^2 x}{\int d^3 x} \quad (3.29)$$

ahol N_{pe} azon pinningek sűrűsége, amelyek fluxusfonalat rögzítenek. Az integrálást elvégezve kapjuk, hogy

$$J_c B = N_p \left(\frac{2}{Aa_0} (u \sqrt{f_p^2 - u^2} + f_p^2 \arcsin \frac{u}{f_p}) \right) \Big|_0^b. \quad (3.30)$$

Az effektív pinningerő különböző határesetekben

$$F_{p\text{tot}} = \frac{N\pi}{Aa_0} f_p^2 \quad \text{ha} \quad Aa_0/2 \cong f_p, \quad (3.31)$$

$$F_{p\text{tot}} = N_p f_p \quad \text{ha} \quad Aa_0/2 \ll f_p. \quad (3.32)$$

3.4. Összehasonlítás a kísérleti eredményekkel

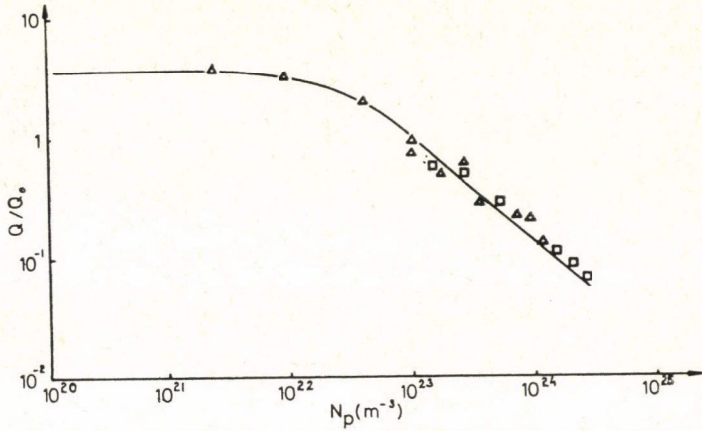
Ahhoz, hogy modellünket összehasonlíthassuk a kísérleti eredményekkel meg kell határozni az effektív pinningsűrűséget.

3.4.1. Az effektív pinningsűrűség

Kramer [103] meghatározta a $F_{p\text{tot}}/N = Q$ értéket N függvényében konstans F_{\max} mellett (2. ábra), az N meghatározásához a fluxusrács rugalmas tulajdonságait is állandó értéken kellene tartani konstans $b = B/B_{c2}$ esetén ez közelítőleg fennáll.

Az ábrán az üres háromszögek Berndt *et al.* [104], a fekete háromszögek Brown [105] és az üres négyzetek Ullmaier *et al.* [44] mérési eredményei besugárzott Nb mintákon.

Ullmaier *et al.* [44] egyszerű modellje szerint nagy pinningsűrűség esetén a vortexrács csak a szupravezető-tartományok közötti pinningsűrűség fluktuációkra érzékeny, ekkor $N_p \sim 1/3$ esetén $F_{p\text{tot}}$ független N_p -től, azaz Q aszimptotikusan $1/N_p$ szerint csökken.



3.2. ábra. A fajlagos pinningerő $Q = F_{p, \text{tot}}/N_p$ az N_p függvényében ($Q = Q_0$, $N_p = 10^{23}/\text{m}^3$)

Hasonló eredményt kaphatunk azzal a feltételezéssel, hogy egy vortexet egy pontban csak pinning centrum rögzíthet [102], a vortexekre merőleges síkban a pinningsűrűség $N_{p,s} = N_p \cdot d$, ahol d a pinning lineáris mérete, véletlen elosztást feltételezve azon vortexek száma, amelyeknek $a_0/2$ sugarú környezetében van pinning centrum egy, a vortexekre merőleges síkban N_v vortexsűrűség esetén

$$N_{\text{eff}} = N_v \left(1 - \left(1 - \frac{1}{N_v} \right)^{N_p} \right) \quad (3.33)$$

határesetekben

$$N_{\text{eff},s} = N_{p,s} (1 - N_{p,s}/2N_v) \quad \text{ha} \quad N_{p,s} < N_v, \quad (3.34)$$

$$N_{\text{eff},s} = N_v \quad \text{ha} \quad N_{p,s} \gg N_v. \quad (3.35)$$

A 3.30. egyenletben szereplő N_p az effektív pinningsűrűség, a jelen közelítő modellben a fluxus fonal mentén egymás mellett elhelyezkedő pinningek kölcsönhatását elhanyagoljuk, illetve csak a rugalmassági állandó változásán keresztül vesszük figyelembe, ezért $N_p = N_{\text{eff},s} d$. Nagy pinningsűrűségek esetén modellünk is $Q \sim 1/N_p$ függést jósol és kis sűrűségek esetén pedig konstans Q -t.

$N_v \sim 10^{14}/\text{m}^2$ ($b=0,55$), így a határérték Ullmaier szerint $N_p \sim 10^{23}$ modellünk alapján $N_p \sim 10^{22}$.

A számítások és kísérletek fontos eredménye, egy $N_p \sim 10^{23}$ esetén, a pinning-sűrűség hatása az effektív pinningerőre elhanyagolható, így az 1. ábrán látható eredményeknél nem kell a pinningsűrűségtől való függést korrigálni.

3.4.2. Összehasonlítás a kísérleti eredményekkel

A pinningerők összegzésére kidolgozott modellünk alapján (1. a 3.30. egyenlet) az $N_p \sim 10^{23}/\text{m}^3$ pinningsűrűség tartományban a fajlagos effektív pinningerő a következő alakot veszi fel:

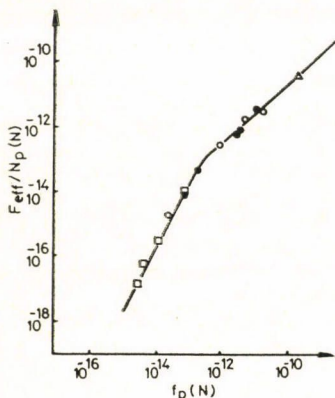
$$Q = f_p^2 / Aa_0 = Cf_p^2 \quad \text{ha} \quad f_p < Aa_0/2, \quad (3.36)$$

$$Q = 1/2 \left\{ \sqrt{f_p^2 - \left(\frac{Aa_0}{2}\right)^2} + 2f_p^2 (Aa_0)^{-1} \arcsin Aa_0/2f_p \right\} \quad \text{ha} \quad f_p > Aa_0/2, \quad (3.37)$$

$$Q = f_p \quad \text{ha} \quad f_p \gg Aa_0. \quad (3.38)$$

A közvetlen összehasonlítást megnehezíti, hogy a f_p számítások inkább csak nagyságrendi becslések, az erőállandó számításának Labusch [86] által kidolgozott módszere csak nagyon híg pinnings esetén érvényes (Nb minták esetén $T=4,2$ K hőmérsékleten, $b=0,5$ mágneses térben a felső határ kb. $10^{20}/\text{m}^3$ pinningsűrűség). A fentiek következtében feltesszük, hogy a valódi pinningerő és a számított pinningerő kapcsolata

$$f_{pv} = kf_{psz} \quad (3.39)$$



3.3. ábra. Az effektív pinningerő az egyedi pinningerő függvényében. (Jelmagyarázat a 3.1. ábránál található!)

a k értékét a görbéről határozzuk meg, $k=0,5$. Az erőállandó értékére $3 \cdot 10^{-13} \text{N}$ értéket kapunk. Ezekkel az értékekkel a kísérleti eredmények az elméletileg számított görbére jól illeszkednek, amint ez a 3.3. ábrán látható [106].

Az erőállandóra kapott érték beleesik az irodalomban található értéktartományba; Labusch [86] alapján 10^{-11}N , Kramer [107] becslése 10^{-13}N , Matsushita és Yamafuji [89] szerint 10^{-14}N .

Összefoglalásképpen elmondhatjuk, hogy az effektív pinningerő számítására kidolgozott modellel a paraméterek szórásán belül leírja a kísérleti eredményeket, megszünteti a küszöbérték kritériummal kapcsolatos ellentmondásokat, alkalmas a kritikus áram meghatározására.

4. ÖSSZEFOGLALÁS

Az alábbiakban összefoglaljuk a dolgozat új tudományos eredményeit.

1. Megmutattuk, hogy a konstruktív termodinamika Callen által javasolt axióma rendszere az alábbi kiegészítéssel már egyértelműen definiálja az entrópiát

$$\lim_{E/V \rightarrow \infty} \frac{\partial S}{\partial E} = 0.$$

Ez a kiegészítés nem vezet ki a konstruktív termodinamika fogalmaköréből; nem használ olyan fogalmakat, mint a kvázisztatikus adiabatikus folyamat.

2. Annak felhasználásával, hogy a nemegyensúlyi rendszerek vizsgálatánál általában csak egy rendszert használunk bevezettük az Általánosított Callen-féle posztulátum rendszert, amelyben az

„entrópia” (ekaentrópia) létezését csak a vizsgált rendszerre követeljük meg. A kapott transzformációs szabály segítségével kibővíthető azon rendszerek köre, amelyek stacionárius állapota minimális produkcióval jellemezhető.

3. Megadtuk a szupravezető állapot kvalitatív leírását, amely keretein belül termodinamikai és kvantummechanikai megfontolások alapján meghatároztuk a hőmérséklet és a mágneses tér hatását a szupravezető állapotra, megmutattuk, hogy $\lambda < \xi$ esetén $H < H_c$ térben a minta tökéletes diamágnes; $\lambda > \xi$ esetén $H < H_{c1}$ térben tökéletes diamágnes, $H_{c1} < H < H_{c2}$ térben a minta parciálisan diamágnes, a mágneses tér behatolása fluxus fonalak alakjában történik, amelyek háromszögrácsot alkotnak.

4. Meghatároztuk egy általános szupravezető fundamentális egyenletét, amely additív tagok formájában tartalmazza a szupravezetők jellemző kölcsönhatásait,

$$dE_s = TdS - pdV + \mu dN + U_{vi} dN_{vi} + V_s d\mathbf{p}_s + \sigma_{ik} \varepsilon_{ik},$$

ahol U_{vi} a vortex potenciál,

$$U_v(r) = \frac{H_{c1}(r) + h(r)}{8\pi} \varphi_0$$

és N_{vi} az U_{vi} vortex potenciállal leírható vortexek száma, V_s a szupraelektron sebesség, \mathbf{P}_s az impulzus, σ_{ik} a feszültség tenzor, ε_{ik} a vortexrács deformáció tenzor.

5. A belső energiamátrix pozitív definitása feltételéből (stabilitási feltétel) az alábbi egyenlőtlenségeket nyertük:

$$\frac{\partial \varepsilon_{kk}}{\partial^n p} > \left\{ \frac{\partial T}{\partial n_p} \right\}^2 \frac{T}{C_v},$$

$$\frac{\partial U_v}{\partial n_v} > \left\{ \frac{\partial T}{\partial n_v} \right\}^2 \frac{T}{C_v}.$$

Az előbbi kritikus állapot-egyenlet abban különbözik az irodalomban használatostól, hogy figyelembe veszi a háromszög rácsszerkezet torzulásából származó erőhatásokat is.

7. Megmutattam, hogy kis GL-paraméterű szupravezető-anyagokban a vortexek nem egyszerre kerülnek kritikus állapotba, ennek hatására a feszültség-áram karakterisztika elveszi lineáris jellegét. Ennek feltétele az, hogy a pinningerők értéke meghaladja a vortex-vortex kölcsönhatási erő értékét.

A megjelenő feszültség:

$$U(I) = \frac{R_n \varphi_0}{B_{c2}} (I - I_{c1}) \theta(I - I_{c1}) n_{sz} + (I - I_{c2}) \theta(I - I_{c2}) n_r$$

ahol $\theta(x) = 0$, ha $x < 0$ és $\theta(x) = 1$, ha $x > 0$.

8. A II. típusú szupravezetők kevert állapotában az effektív pinning-sűrűség meghatározására adtunk egy becslést, amely szerint

$$N_{eff} = N_v \left(1 - \left(1 - \frac{1}{N_v} \right)^{N_{p,s}} \right)$$

ahol N_v a vortexsűrűség, $N_{p,s}$ a területi pinningsűrűség, az jól illeszkedik a besugárzott Nb mintákon kapott kísérleti eredményekhez.

9. A nem potenciálból származtatható pinningerők feltételezésével egy új összegezési eljárást dolgoztunk ki az effektív pinning erő (kritikus áram) meghatározására (K. Martinás 1981b)

$$F_p/N_p = c f_p^2 \quad \text{ha} \quad f_p < C$$

$$F_p/N_p = 1/2 \{ \sqrt{f_p^2 - c^2} + f_p^2/C \cdot \arcsin C/f_p \} f_p > C$$

$$F_p/N_p = f_p$$

$$f_p \gg C$$

Ez az eredmény mentes a küszöbérték kritériummal kapcsolatos problémáktól, jól leírja a mérési eredményeket.

Fontosabb jelölések:

a_0	vortex rácsállandó
A	vektor potenciál
b	redukált mágneses tér, $b = B/B_{c2}$
B	mágneses indukció
c	fénysebesség, indexben: kritikus
C	fajhő (2. fejezet), Rugalmas állandó (3. fejezet)
e	elektrontöltés
e_{ik}	energiamátrix
E	belső energia
E, e	elektromos térerősség
E_k	kötési energia
f	szabadenergia sűrűség
F	szabad energia
f_p	egyedi pinningerő
$F_p, F_{p\text{eff}}$	effektív pinningerő
G	Gibbs potenciál
g_{ik}	entrópiamátrix
H	entalpia
H_c	mágneses tér
H_c	termodinamikai kritikus mágneses tér
H_{c1}	alsó kritikus mágneses tér
H_{c2}	felső kritikus mágneses tér
I	áram
j	áramsűrűség
\mathbf{j}	áramsűrűség vektor
j_v	vortexáram sűrűség
L_{ik}	vezetési mátrix
M	mágneses momentum
n	indexben: normál
n_e	elektronsűrűség
n_v	vorteksűrűség
n_p	pinningsűrűség
N_{eff}	effektív pinningsűrűség
$N(0)$	állapotsűrűség
P	az általánosított Callen Posztulátum-rendszer által definiált P potenciál függvény (1. fejezet)
P	nyomás (2. fejezet), indexben: pár (2. fejezet), pinning (3. fejezet)
\mathbf{P}	impulzus
Q	a Callen posztulátum-rendszer által definiált „entrópia”
q_{ik}	Q mátrix
r	indexben: rögzített vortex
R_n	ellenállás normál állapotban
S	entrópia
s	indexben: szupravezető
s_z	indexben: szabad vortex
T	hőmérséklet
U	feszültség
U_v	vortex potenciál
V	térfogat
v	indexben: vortex
v	sebesség
X	extenzív paraméter
Y	intenzív paraméter
β	vortex elmozdulás
ε	deformáció tenzor
η	vortex belső súrlódási koefficiens
κ	Ginzburg—Landau paraméter
λ	mágneses behatolási mélység

μ	kémiai potenciál
ξ	koherenciahossz
Q	sűrűség
Φ_0	mágneses fluxus kvantum
φ_0	$\Phi_0 \cdot \mathbf{r}$
σ	feszültség tenzor

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Szeretném köszönetemet kifejezni mindazon kollégáimnak és munkatársaimnak, akik e dolgozattal kapcsolatos kutatásaim elvégzésében segítségemre voltak.

Őszinte köszönetemet fejezem ki *Dr. Kirschner István* tanszékvezető egyetemi tanárnak, a fizikai tudományok doktorának támogatásáért és hasznos szakmai tanácsaiért.

Őszinte hálámat fejezem ki *dr. Sándor János* egyetemi docensnek, *dr. Gyarmati István* akadémikusnak, *dr. Marx György* akadémikusnak, *dr. Verhás József* és *dr. Farkas Henrik* egyetemi docenseknek.

Megköszönöm tevékenységét *dr. Bánkuti József*, *dr. Kiss György*, *Lászlóffy László*, *dr. Reményi György*, *dr. Sajó Konstantin*, *dr. Törös Róbert* kollégáknak, akik egyes számítások végzésében közreműködtek, és ezzel számomra határos támogatást nyújtottak.

Megköszönöm *Gesztli Tamásnak*, hogy a 1.2.5. fejezetben tárgyalta problémára felhívta a figyelmet.

IRODALOM

1. *J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer*, Phys. Rev. 108, 1175, 1957.
- 2.a. *V. L. Ginzburg and L. D. Landau*, Zh. eksp. teor. Fiz. 20, 1064, 1950.
- 2.b. *A. A. Abrikosov*, Zh. eksp. teor. Fiz. 32, 1442, 1957.
- 2.c. *L. P. Gorkov*, Zh. eksp. teor. Fiz. 36, 1918; 37, 833, 1407, 1959.
3. *J. E. Kunzler, E. Buechler, F. S. L. Hsu and J. M. Wernick*, Phys. Rev. Letts. 6, 89, 1961.
4. *H. B. Callen*, Thermodynamics, John Wiley, New York, 1960.
5. *E. A. Guggenheim*, Proc. Phys. Soc. (B) 79, 1079, 1962.
6. *N. L. S. Carnot*, Reflections sur la puissance motrice du feu et sur les machines propre á développer cette puissance, Bachelier, Paris, 1824.
(magyarul: Matematikai és Fizikai Lapok, 6, 5, 247, 1897.)
7. *R. Clausius*, Pogg. Ann., Series V, Book 5, p. 353, 1865.
8. *J. W. Gibbs* Collected Works, Langmans, Green, New York, 1928.
9. *C. Carathéodory*, Math. Ann. 67, 355, 1909.
10. *T. Ehrenfest-Afanassjew*, Zs. f. Phys. 33, 933, 34, 638, 1925.
11. *M. Born*, Phys. Zs. 22, 234, 1921.
12. *A. Lande*, Handbuch der Physik, Band IX, 1926.
13. *P. T. Landsberg*, Thermodynamics, J. Wiley, New York, 1961.
14. *I. Gyarmati*, Acta Chim. Hung. 30, 147, 1962.
15. *I. Fényes*, Zs. f. Phys. 134, 95, 1952.
16. *I. Fényes*, Termosztatika és termodinamika, Műszaki Könyvkiadó Budapest, 1968.
17. *L. Tisza*, Ann. of Phys. 13, 1, 1961.
18. *I. Kirschner*, Acta Phys. Hung. 29, 319, 1970.
19. *I. Kirschner*, Acta Phys. Hung. 30, 61, 1971.
20. *K. Martinás*, BME kiadvány, p. 157, 1977.
21. *K. Martinás*, Acta Phys. Hung. 50, 121, 1981.
22. *L. Onsager*, Phys. Rev. 37, 405, 38, 2265, 1931.
23. *I. Gyarmati*, Zs. Phys. Chem. 239, 133, 1968.
24. *I. Gyarmati*, Ann. Phys. 23, 353, 1969.
25. *I. Gyarmati*, Nemegyensúlyi termodinamika, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1978.
26. *P. Glansdorf, I. Prigogine*, Thermodynamic Theory of Structure, Stability and Fluctuations, Wiley-Interscience, London, 1971.
27. *M. E. Gurtin*, in: Mechanics Today, Vol. I., ed. S. Nemat-Nasser, Pergamon Press, N. Y., 1972.
28. *S. Nemat-Nasser*, in: Mechanics Today, vol. II., Pergamon Press, New York, 1975.
29. *J. Meixner*, Zs. f. Phys. 146, 145, 1961.

30. *H. Farkas*, Zs. Phys. Chem. 239, 124, 1968.
31. *K. Martinás*, előkészületben
32. *N. F. Ramsey*, Phys. Rev., 103, 20, 1956.
33. *H. Kammerlingh-Onnes*, Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden, No. 119, 122, 1911.
34. *W. Meissner*, *R. Ochsenfeld*, Naturwiss. 21, 787, 1933.
35. *F. London*, *H. London*, Proc. Roy. Soc. A, 152, 24, 1935.
36. *C. J. Gorter*, *H. B. G. Casimir*, Physica, 1, 306, 1934.
37. *E. Maxwell*, Phys. Rev. 78, 477, 1950.
38. *J. G. Daunt*, *K. Mendelsohn*, Proc. Roy. Soc. (London) A285, 225, 1946.
39. *L. N. Cooper*, Phys. Rev. 104, 1189, 1956.
40. *A. Schmid*, J. Low Temp. Phys. 40, 101, 1980.
41. *J. Friedel*, *P. G. DeGennes*, *J. Matricon*, Appl. Phys. Lett. 2, 119, 1963.
42. *B. D. Josephson*, Phys. Rev. A152, 211, 1966.
43. *A. M. Campbell*, *J. E. Evetts*, *D. Dew-Hughes*, Phil. Mag. 18, 313, 1968.
44. *H. Ullmaier*, Irreversible Properties of Type II. Superconductors, Springer, Berlin, 1975.
45. *K. Martinás*, Egyetemi doktori disszertáció, Budapest, 1973.
46. *K. Martinás*, *I. Kirschner*, Acta Phys. Hung. 40, 297, 1976.
47. *K. Martinás*, Fizikai Szemle, 32, 367, 1979.
48. *V. F. Weisskopf*, Contemp. Phys. 22, 375, 1981.
49. *P. G. DeGennes*, Superconductivity of Metals and Alloys, Benjamin, New York, 1966.
50. *I. Kirschner*, *K. Martinás*, 12. Int. Konf. Phys und Tech. Tiefen Temp. Székesfehérvár, p. 97, 1973.
51. *I. Kirschner*, *K. Martinás*, J. Low Temp. Phys. 14, 427, 1974.
52. *I. Kirschner*, *K. Martinás*, *R. Törös*, Acta Phys. Hung. 37, 17, 1974.
53. *I. Kirschner*, *K. Martinás*, 18. Int. Konf. Phys und Tech. Tiefen Temp. Dresden, p. 115, 1979.
54. *I. Kirschner*, *K. Martinás*, Mitteil. Festkörperphysik DPG, p. 385, Münster, 1979.
55. *J. Bánkúti*, *I. Kirschner*, *K. Martinás*, *K. Sajó*, Ann. Conf. Cond. Matter Div. EPS, Antwerpen, p. 266, 1980.
- In: Recent Developments in Condensed Matter Physics, Plenum Publ. Co., Vol. 4, p. 389, New York, 1981.
56. *I. Kirschner*, *K. Martinás*, Acta Phys. Hung. 51, 167, 1981.
57. *R. Labusch*, Crystal Lattice Defects, 1, 1, 1969.
58. *E. H. Brandt*, Phys. Stat. Sol. 77, 551, 1976.
59. *U. П. Вазаров*, Гермодинамика, p. 154, Вист. школа, Москва, 1981.
60. *V. Eckern*, *A. Schmid*, *M. Schmutz* and *Z. Schön*, J. Low Temps 1979. Phys. 36, 643.
61. *A. M. Campbell*, *J. E. Evetts*, Adv. Phys. 21, 199, 1972.
62. *M. Stephen*, Phys. Rev. Letts. 16, 801, 1966.
63. *K. Maki*, Phys. Rev. 148, 362, 1966.
64. *A. Hariedi*, *Gy. Kiss*, *Gy. Reményi*, 14. Int. Konf. Soz. Länder ü. Phys. und Techn. Tiefen Temp. p. 64, 1975.
65. *Gy. Reményi*, Egyetemi doktori értekezés, Budapest, 1975.
66. *A. A. Hariedi*, *Gy. Kiss*, *Gy. Reményi*, Mitt. der 18. Intern. Konf. über Physik der tiefen Temperaturen, Dresden, p. 84, 1979.
67. *Y. B. Kim*, *M. J. Stephen*, in: Superconductivity p. 1107 ed. by *R. M. Parks*, Dekker, New York, 1969.
68. *B. Shinozaki*, *T. Miyazaki*, *T. Aoki*, *S. Yamashita*, *M. Katayama*, J. Phys. Soc. Japan, 48, 1901, 1980.
69. *J. A. Cape*, *P. F. Silvera*, Phys. Rev. Letts. 20, 326, 1968.
70. *W. R. Hudson*, *R. J. Jirberg*, Solid State Comm. 429, 1969.
71. *I. Kirschner*, *K. Martinás*, Acta Phys. Hung. 30, 311, 1971.
72. *J. Bánkúti*, *I. Kirschner*, *G. Kiss*, *I. Kovács*, *L. Lászlóffy*, *G. Reményi*, *K. Sajó*, Zh. Eksp. I. Teor. Fiz. 66, 2141, 1974. (English transl. Sov. Phys—JETP 39, 1054, 1974.)
73. *Yu. K. Krasnov*, *L. V. Matyushkina*, *V. A. Shukhman*, Fiz. Nyiz. Temp. 5, 109, 1979.
74. *Yu. K. Krasnov*, *L. V. Matyushkina*, *V. A. Shukhman*, J. Phys. C-6 Vol. 1, 629, 631, 1978.
75. *U. J. Essmann*, *H. Trauble*, J. Appl. Phys. 39, 4052, 1968.
76. *C. P. Bean*, Phys. Rev. Letts. 8, 520, 1962.
77. *C. P. Bean*, Rev. Mod. Phys. 36, 31, 1964.
78. *H. Ullmaier*, Phys. Stat. Sol. 41, 671, 1970.
- H. A. Ullmaier*, *K. Papastaikoudis*, *S. Takács* and *W. Schilling*, Phys. Stat. Sol. 41, 671, 1970.
- ibid, 38, 169, 1970.

79. *G. Brandli*, *Helv. Phys. Acta* **41**, 706, 1968.
80. *G. A. Alers, D. L. Waldorf*, *Phys. Phys. Rev. Letts.* **9**, 309, 1969.
81. *R. Labusch*, *Phys. Rev.* **170**, 470, 1968.
82. *E. J. Kramer, C. L. Braum*, *Phyl. Mag.* **15**, 1189, 1967.
83. *H. C. Freyhardt*, *Phil. Mag. B*, **38**, 15, 1978.
84. *W. W. Webb*, *Phys. Rev. Letts.* **11**, 191, 1963.
85. *K. Yamafuji, F. Irie*, *Phys. Lett.* **A25**, 387, 1967.
86. *R. Labusch*, *Crystal Latt. Def.* **1**, 1, 1969.
87. *A. M. Campbell*, *Phil. Mag. B*, **37**, 149, 1978.
88. *A. Schmid, W. Hauger, J. Low Temp. Phys.* **11**, 667, 1973.
89. *T. Matsushita, K. Yamafuji*, *J. Phys. Soc. Japan*, **48**, 1885, 1980.
90. *D. C. Agrawal, E. J. Kramer, B. A. Loomis*, *Phil. Mag.* **33**, 343, 1976.
91. *C. C. Koch, N. C. Freyhardt, J. O. Scarborough*, *Proc. of 1976 Appl. Superconductivity Conf., Stanford*, 1976.
92. *C. C. Koch, A. Dasgupta, C. M. Kroeger, J. O. Scarborough*, *Phil. Mag. B* **40**, 361, 1979.
93. *G. Lippmann, J. Schelten, W. Schmatz*, *Phil. Mag.* **33**, 475, 1976.
94. *Rollins, J. Bentley*, *J. Nucl. Materials* **72**, 28, 1978.
95. *D. Dew-Hughes*, *Phil. Mag.* **30**, 29, 1974.
96. *R. Schmucker, E. H. Brandt*, *Phys. stat. sol. (b)* **79**, 479, 1972.
97. *E. H. Brandt*, *Phys. Lett.* **77A**, 484, 1980.
98. *A. I. Larkin and Yu. N. Ovchinnikov*, *J. Low Temp. Phys.* **34**, 409, 1979.
99. *S. Takács*, *Czech. J. Phys. B* **29**, 1046, 1979.
100. *A. M. Campbell*, *Phil. Mag. B*, **34**, 111, 1976.
101. *E. H. Brandt*, *Phil. Mag. B* **37**, 293, 1978.
102. *K. Martinás*, *Phys. Lett.* **A82**, 369, 1981.
103. *E. J. Kramer*, *J. Nucl. Mat.* **72**, 5, 1978.
104. *H. Berndt, N. Kartascheff, H. Wenzl*, *Zf. Angew. Phys.* **24**, 305, 1967.
105. *B. S. Brown*, *Proc. Int. Disc. Meeting On Flux Pinning in Superconductors*, P. Haasen and H. C. Freyhardt, ed. p. 200, Göttingen, 1976.
106. *I. Kirschner, K. Martinás*, *J. Low Temp. Phys.* **47**, 105, 1982.
107. *E. J. Kramer*, *J. Appl. Phys.* **44**, 1360, 1973.

A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó és Nyomda főigazgatója
Műszaki szerkesztő: Sándor István
A kézirat a nyomdába érkezett: 1984. október 3. — Terjedelem: 9,45 (A/5) iv
85-1460 — Szegedi Nyomda, Szeged — F. v.: Dobó József igazgató

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Balásházy Imre</i> : Áramló aeroszolk lecsapódásának modell vizsgálata.....	127
<i>Martinás Katalin</i> : Transzportfolyamatok irreverzibilis termodinamikai elmélete és alkalmazása a szupravezetők vizsgálatában	181

307.226

1

IV.

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

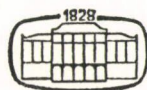
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXXIII. KÖTET

3. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1985

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendőek:

Turchányi György egyetemi tanár
Biofizikai Intézet
1444 Budapest VII., Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 120 Ft, Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest, V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215—11 488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218—10 990 útján eszközölhetők).

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetet és főbb lépéseit közölgék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

KÁOSZ DISZKRÉT EGYDIMENZIÓS RENDSZEREKBEN*

GYÖRGYI GÉZA

ELTE, Elméleti Fizikai Tanszék, Budapest

TARTALOMJEGYZÉK

Előszó	236
1. Bevezetés	236
2. A káosz tulajdonságai és kialakulása számítógépes és laboratóriumi mérések tükrében	238
3. Disszipatív rendszerek egy modellje: az egydimenziós leképezés	243
3.1. Bifurkációk és káosz egydimenziós rendszerekben	243
3.2. Skálatulajdonságok, univerzalitás	250
4. A teljesen kifejlődött káosz egydimenziós rendszerekben	253
4.1. A master egyenlet	253
4.2. Ekvivalens leképezések	255
4.3. Aszimmetrikus leképezések szimmetrizálása	257
4.3.1. A szimmetrizálási eljárás	257
4.3.2. Példa a szimmetrizálásra	258
4.4. A valószínűség sűrűség függvény szimmetriájának egy szükséges feltétele	260
5. A probléma	261
6. A sztochasztikus viselkedés leírása perturbatív úton	261
6.1. A valószínűség sűrűség függvény analitikus közelítése	261
6.1.1. A korrekciók meghatározásának általános módszere	261
6.1.2. A perturbációszámítás alkalmazása polinom leképezésekre	264
6.2. A Ljapunov-exponens és egy felső korlátja	267
6.3. A korrelációs függvény	269
7. Egy numerikus módszer: a master egyenlet iterációja	271
8. Elméleti és számítógéppel nyert eredmények összehasonlítása	272
9. Egzakt megoldások	276
9.1. A master egyenlet általános vizsgálata	276
9.2. Példák egzaktul megoldható problémákra	277
9.2.1. Egy szakaszonként lineáris leképezés	277
9.2.2. Az egyenletestől ferdén szimmetrikusan eltérő valószínűség sűrűség esete	278
9.2.3. Formális egzakt megoldások	283
10. Összefoglalás	285
Köszönetnyilvánítás	286
A. Függelék	286
B. Függelék	287

* Érkezett 1983. június 1. Egyetemi doktori értekezés

C. Függelék	287
D. Függelék	288
Irodalomjegyzék	288

The true logic of this world is the calculus of probabilities.

Maxwell

ELŐSZÓ

Az elmúlt években az erősen nemlineáris dinamikai rendszerek vizsgálata az érdeklődés homlokterébe került. Jelentős eredmények születtek egy tipikus nemlineáris jelenség, a káosz és az azzal kapcsolatos instabilitások megértése terén. A determinisztikus rendszerekben fellépő véletlenszerű jelenségek tanulmányozása megváltozott szemléletmódot követel. A kaotikus mozgás leírására az időtől függő trajektória nem alkalmas, ezért statisztikai módszerekhez kell folyamodnunk. Két kérdést kell általában megválaszolni. Egyrészt, a fázistér mely tartományára korlátozódik a mozgás, azaz — amennyiben a jelenséget disszipáció kíséri — mi a rendszer különös attraktora, másrészt milyen valószínűség eloszlással jellemezhetjük a viselkedést e tartományon belül. Számos elméleti és numerikus kísérleti eredmény bővítette a közelmúltban a különös attraktor szerkezetére vonatkozó ismereteinket, s ennek során a mozgás sztochasztikus tulajdonságaival kapcsolatban problémák sokasága vetődött fel. Közülük egyet megoldva, e dolgozatban a legegyszerűbb nemlineáris rendszer, az egydimenziós leképezés széles osztályai esetén írjuk le a véletlenszerű dinamikai viselkedést.

1. BEVEZETÉS

A kaotikus viselkedés az utóbbi időben legtöbbet vizsgált nemlineáris dinamikai jelenségek közé tartozik. Káoszt számos fizikai, kémiai, biológiai rendszerben, közgazdasági modellben figyeltek meg. A témakörrel több áttekintő munka született [1—6], s a közelmúltban magyar nyelvű összefoglaló is megjelent [7], melyekben kimerítő irodalomjegyzék áll az olvasó rendelkezésére.

Káoszlól akkor beszélünk, ha egy determinisztikus rendszer viselkedése hosszú távon kiszámíthatatlan, véletlenszerű. Ilyen mozgás már néhány nemlineáris módon csatolt közönséges differenciálegyenlet megoldásaként is adódhat, s a jelenség fellép egy- vagy többdimenziós diszkrét leképezésekben is. A káosz a nemlineáris rendszerek egy tipikus állapota.

A fázistérbeli trajektóriák kezdeti feltételre mutatott érzékenysége a kaotikus viselkedés alapvető tulajdonsága. Az érzékenységet jellemző mennyiségeket a véletlenszerűség fokmérőjének tekinthetjük. Az egymáshoz közel került trajektóriák általában exponenciálisan újból eltávolodnak egymástól; az adott irányban történő távolodás átlagos gyorsaságát az ún. Ljapunov-exponens jellemzi [8]. A mozgás kiszámíthatatlanságát mutatja a korrelációs függvény, illetve a frekvencia spektrum. A kaotikus trajektóriák aszimptotikusan korrelálatlanok, s a spektrum alapján egyfajta zaj jelenlétére következtethetünk. A zaj determinisztikus, mert nem végtelen

sok szabadsági fokkal való kölcsönhatásból származik, hanem néhány változó nemlineáris csatolódása okozza.

Konzervatív és disszipatív rendszerekben egyaránt megfigyelhető sztochasztikus mozgás, tulajdonságai azonban a kétféle esetben igen eltérőek. Az alábbiakban disszipatív rendszerekről esik szó, a hamiltoni káossal kapcsolatosan összefoglaló munkákra hivatkozunk csupán [5—7, 9—10].

Disszipatív rendszerekben a kaotikus trajektóriák egy általában nem egész dimenziójú fázistérbeli képződményhez, a különös attraktorokhoz tartanak. A külső paraméterek változtatásával a pályákat vonzó attraktorok szerkezete, elhelyezkedése módosul. A káosz fontos sajátossága, hogy a különös attraktor szerkezete gyakran végtelenül érzékeny a külső paraméterek beállítására.

A káosz tulajdonságai és kialakulásának módjai sok szempontból hasonlóságot mutatnak különböző mozgásegyenletek esetén is. Ezt nevezzük univerzalitásnak (ld. pl. [11]).

A legegyszerűbb nemlineáris rendszer, amelyben sztochasztikus viselkedés figyelhető meg, a nem invertálható egydimenziós leképezés. Vizsgálatát számos tényező motiválja. Az első sorban kell megemlíteni, hogy segítségével magasabb szabadsági fokú modellekben és reális fizikai rendszerekben tapasztalt jelenségek — köztük az univerzalitás tulajdonsága — érthetőek meg, s írhatóak le kvantitatív módon. Az egyensúlyi termodinamika és a vezetési jelenségek köréből több speciális probléma összefüggésbe hozható véletlenszerű iterációkat generáló egydimenziós leképezésekkel.* Az egydimenziós leképezéssel közvetlenül modellezhetőek biológiai, közgazdasági jelenségek, s felmerül egyenletek numerikus megoldásaival kapcsolatban is.

A dolgozatban egydimenziós diszkrét rendszerek sztochasztikus tulajdonságait tanulmányozzuk a kontrollparaméter speciális értékei mellett, az ún. teljesen kifejlődött káosz állapotában. Az ismertetendő új eredményeket az alábbiakban összegezzük. *i)* Általános eljárást adunk arra, miképp transzformálhatóak nem szimmetrikus leképezések szimmetrikussá, s ezt példákkal is illusztráljuk. *ii)* Megadjuk a valószínűség sűrűség függvény szimmetriájának egy szükséges feltételét. Kimutatjuk, hogy szimmetrikus leképezésekhez általában nem szimmetrikus sűrűség függvény tartozik, másképpen szólva, a szimmetrikus sima leképezések és a logisztikus leképezés között általában nem áll fenn metrikus ekvivalencia. *iii)* Perturbatív módszert dolgozunk ki a valószínűség sűrűség függvény számítására. *iv)* Megmutatjuk, a perturbációszámítás polinom leképezések esetén tetszőleges, véges rendig explicit módon elvégezhető. Alacsonyabb rendekben konkrét formulákat adunk. *v)* Felírjuk a Ljapunov-exponens és a korrelációs függvény első nem eltűnő korrekcióira vonatkozó általános képleteket, s néhány esetben konkrét számításokat is végzünk. Eredményeinket numerikus kísérletekből származókkal összevetve jó egyezést találunk velük. *vi)* Analitikus közelítést adunk a Ljapunov-exponens kritikus viselkedését jellemző univerzális amplitúdóra. *vii)* Sok esetben hatékony függvényiterációs módszert javasolunk numerikus célokra. Az eljárás analitikus formulák gyors levezetéséhez is segítséget nyújt egyes esetekben. *viii)* A leképezések két családjára a valószínűség sűrűség függvényt egzakt módon megadjuk.

* Közülük megemlíti az Anderson-lokalizáció kérdését [12] és egyes hierarchikus modelleket (ld. [13] és az abban található hivatkozásokat).

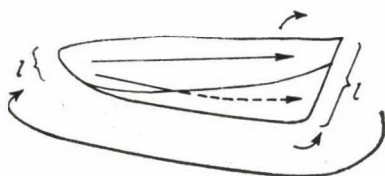
A dolgozat 2. fejezetében a kaotikus viselkedés általános sajátosságait mutatjuk be. A 3. fejezetet a kontrollparamétert is tartalmazó egydimenziós leképezés dinamikai tulajdonságai leírásának szenteljük. A teljesen kifejlődött káosz állapotát részletesen tanulmányozzuk a 4. fejezetben, s az 5. fejezetben vázoljuk a megoldandó problémát. A perturbációs eljárás részletes tárgyalására a 6. fejezetben kerül sor, míg a 7. fejezetben egy függvényiterációs módszert vezetünk be. Elméleti eredményeinket a 8. fejezetben hasonlítjuk össze számítógépes mérésekből származókkal. A 9. fejezetet az egzakt módon leírható sztochasztikus iterációknak szenteljük. A 10. fejezetben a leképezések terének szemléletes ábrázolásával összefoglaljuk eredményeinket.

Az értekezésben *Szépfolusy Péterrel* közösen kidolgozott eredményekről számolok be, ezért többes szám első személyt használok. Itt jegyzem meg, hogy a nem invertálható transzformációval történő szimmetrizálási eljárásra *Bene Gyula* hívta fel a figyelmemet. A 4.3.2., 6.1.2., 7., 9.1., 9.2.1., 9.2.3. fejezetekben ismertetettek teljesen, a 4—9. fejezetek egyéb szakaszaiban közöltek részben saját munkám eredményei.

2. A KÁOSZ TULAJDONSÁGAI ÉS KIALAKULÁSA SZÁMÍTÓGÉPES ÉS LABORATÓRIUMI MÉRÉSEK TÜKRÉBEN

A determinisztikus rendszerekbeli véletlenszerű, kaotikus viselkedés és az azzal kapcsolatos más nemlineáris jelenségek sokfélesége miatt a témakör teljes bemutatására itt nem vállalkozhatunk. Az alábbiakban néhány példán keresztül szemléletes képet kívánunk adni a káosz jellegzetes tulajdonságairól. Előtérbe helyezzük a végtelen sok szabadsági fokú fizikai rendszerek, a néhány változót tartalmazó nemlineáris modellek és az egydimenziós diszkrét leképezések viselkedésének *közös vonásait*, különös tekintettel a kísérletek és az elmélet kapcsolatára.

Tekintsünk először alacsony szabadsági fokú, elsőrendű differenciálegyenletekkel leírható rendszereket. A kaotikus mozgás jellegzetessége, hogy a fázistérben az egymáshoz közel kerülő trajektóriák igen gyorsan újból eltávolodnak. A fázistér egy része az idő múlásával tehát legalább az egyik irányban megnyúlik. A trajektóriák véges térrészen belül maradása megfelelő visszatérési mechanizmussal érhető el. A jelenséget szemléltethetjük szélesedő, kettéhajtott s a végeinél újból összeillesztett szalaggal. Általában azt mondhatjuk, az ilyen értelemben vett *nyújtás* és *visszahajtás* a feltétele annak, hogy kaotikus viselkedés alakuljon ki. Kétdimenziós felületen azonban nem alakulhat ki folytonos véletlenszerű mozgás, az elsőrendű mozgásegyenletek megoldásai ugyanis egymást nem metsző trajektóriák. Kaotikus viselkedést ezért csak kettőnél nagyobb dimenziószámú képződményeken figyelhetünk meg folytonos rendszerekben. A disszipáció következményeképpen azonban a trajektóriák mentén a fázistér fogat csökken. Háromdimenziós fázistérben ezért olyan alakzaton zajlik véletlenszerű mozgás, amelynek dimenziószáma háromnál kisebb és kettőnél nagyobb. Trajektóriákat magához von-



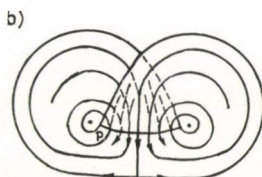
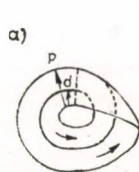
2.1. ábra. A nyújtás és visszahajtás szemléltetése

zó, általuk sztochasztikus módon bejárt képződményeket *különös attraktoroknak* nevezzük. Különös attraktor magasabb dimenziószámú rendszerekben is kialakulhat.

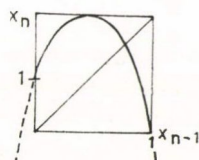
Nem egész dimenziójú alakzatra példa a Cantor-típusú halmaz, amelynek dimenziója egynél kisebb törtszám, ld. pl [14]. A különös attraktor általában egy (hiper)-felület és egy Cantor-típusú halmaz direkt szorzataként áll elő, s a bonyolult módon keveredő trajektóriák a különböző felületek között közlekedve kerülik el egymást.

A különös attraktorokat osztályozhatjuk aszerint, milyen a megfelelő felület szerkezete, hogyan történik a trajektóriák visszatérítése [15]. Két példát mutatunk be, a Rössler- és a Lorenz-típusú különös attraktort (ld. [11]).

A Rössler-típusú felületet szemléletesen úgy kapjuk, hogy egy körbehajlított, szélesedő szalag végét kétrét hajtvá illesztjük a kiindulási vonalhoz. A Lorenz-típusú különös attraktor szerkezetének megértését a bejelölt trajektóriák segítik. Addig történik a mozgás az egyik levélen, amíg a spirál sugara el nem ér egy kritikus értéket, s ekkor a trajektória a másik levélre kerül. A sztochasztikus viselkedés itt igen szemléletesen nyilvánul meg: közel indított trajektóriák elég hosszú idő múlva véletlenszerűen váltanak át az egyik levélről a másikra, egymással nem korrelált módon.



2.2a—b. ábra. A Rössler- és Lorenz-típusú visszatérítési mechanizmus



2.3. ábra. A Rössler-típusú attraktorhoz tartozó Poincaré-leképezés

Ha a szóban forgó rendszer *erősen disszipatív*, akkor a megfelelő Cantor-halmaz dimenziója zérushoz közeli érték. Háromdimenziós problémánál ez azt jelenti, a különös attraktor jó közelítéssel kétdimenziós felülettel írható le. A mozgás ezen sztochasztikus, az időfüggő trajektória meghatározása általában nem lehetséges. A véletlenszerű tulajdonságok globálisan leírhatóak, ha a trajektóriát bizonyos kiemelt időpontokban vizsgáljuk. A Rössler-típusú különös attraktornál ez úgy történhet, hogy minden körülfordulás után feljegyezzük a P vonal átmetszésének x_n helyét. Ily módon az

$$x_{n+1} = f(x_n) \quad (2.1)$$

egydimenziós diszkrét leképezéshez jutunk. Ennek az ún. Poincaré-leképezésnek egy tipikus menetét mutatjuk be a 2.3. ábrán [11, 16].

Adott x_0 kezdeti értékről indulva, a generált x_n képpontokat a 45° -os egyenes segítségével az abszcisszára visszavetítve, majd újra leképezve őket a rajz alapján az iteráció pontjait megszerkeszthetjük. Ha a megfelelő egydimenziós leképezés tulajdonságait meghatározzuk, ezzel egyben a folytonos mozgás lényeges vonásait is leírjuk.

Megjegyezzük, Poincaré módszere nemcsak kaotikus jelenségek vizsgálatára alkalmas, egyszerűbb mozgások is tanulmányozhatóak a segítségével. Ilyenkor azonban gyakran van esélyünk a trajektória analitikus leírására is.

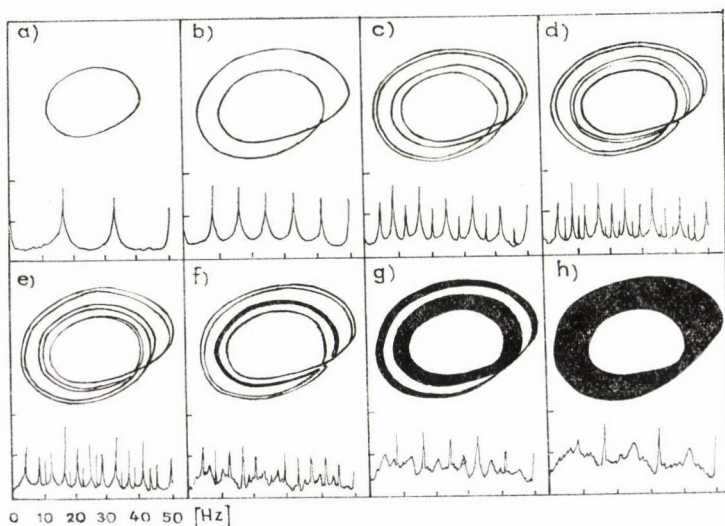
A különös attraktor az attraktoroknak csak egy típusa. Az általános esetben disszipatív rendszerek fázisterét feloszthatjuk különböző attraktorok vonzási tartományaira, s előfordulhatnak végtelenbe távozó trajektóriák is. A fázistér szerkezete a rendszer *kontrollparamétereinek* függvényében változhat.

Különös attraktorokat rendkívül nagyszámú modellben figyeltek meg numerikus módszerekkel (ld. pl. [11, 17–21]). Az alábbiakban két immár klasszikusnak számító rendszert mutatunk be.

A Rössler-modell [22] egy harmadik változóhoz (z) nemlineáris módon csatolt harmonikus oszcillátor (x, y):

$$\left. \begin{aligned} \dot{x} &= -(y + \varepsilon z), \\ \dot{y} &= x + \varepsilon r y, \\ \dot{z} &= 1 + (x - c)z. \end{aligned} \right\} \quad (2.2)$$

A rendszer kontrollparamétere r , c és ε . A 2.4. ábrán az $\varepsilon=0,2$, $r=1$ és különböző c értékek mellett mutatjuk be a trajektóriák $x-y$ síkra való vetületének aszimptotikus viselkedését [23].



2.4a–h. ábra. A Rössler-modell fázisgörbéi és a megfelelő frekvencia spektrum. A c paraméter értékei rendre a) 2,6; b) 3,5; c) 4,1; d) 4,18; e) 4,21; f) 4,23; g) 4,30; h) 4,60

A $c=4,60$ esetben a 2.2a. ábrán szemléltetett különös attraktor jelenik meg. Kisebb c mellett azonban a véletlenszerű viselkedés sávokra szűkül, a mozgás káosz és hosszú periódusú oszcilláció szuperpozíciója. Ennek megfelelően a trajektória Fourier spektrumában alharmonikus frekvenciáknál újabb csúcsok jelennek meg. A véletlenszerűség fokát jellemző *determinisztikus zaj* intenzitása eközben csökken. A $c < c_{\infty} \approx 4,2$

tartományban határciklus az attraktor, ilyenkor determinisztikus zaj nem lép fel. A határciklus periódusideje bizonyos kontrollparaméter értékeket túllépve ugrászerűen a kétszeresére nő, ez a *periódus kettőződő bifurkáció* jelensége. A $c_\infty < c$ tartományban inverz bifurkációkról beszélhetünk. Számos más, nemlineáris modellben is megfigyeltek hasonló jelenségsorozatokat, és magasabb rendű bifurkációkat is találtak a rendszerre jellemző R_∞ kritikus kontrollparaméter érték körül torlódva [18, 24–28]. Nemcsak folytonos, hanem többdimenziós diszkrét modellekben is megvalósul a káosz kialakulásának itt bemutatott ún. Feigenbaum-féle útja (ld. pl. [11]). Általános tapasztalat, hogy aszimptotikusan

$$\left| \frac{R_k - R_{k-1}}{R_{k+1} - R_k} \right| \approx \delta = 4,7, \quad (2.3)$$

ahol R_k a k -adik periódus kettőződő bifurkációhoz vagy a k -adik inverz bifurkációhoz tartozó kontrollparaméter értéknek egyaránt tekinthető. Ez a szám a kaotikus viselkedést mutató rendszerek jelentős csoportján *univerzálisnak* bizonyult. Ennek és más univerzális jelenség magyarázatát szemléletesen annak tulajdoníthatjuk, hogy a megfelelő egydimenziós leképezés sima függvény (ld. 3.2. fejezet).

A káosz kialakulásának több tipikus útját megfigyelték (ld. [11]). Tekintsük például az ún. Lorenz-egyenleteket, amelyeket hidrodinamikai instabilitások leírására vezettek be [29], s amelyek aszimptotikusan egzaktul leírják az egy módust tartalmazó félklasszikus lézermódel viselkedését [30, 31].

A Lorenz-módel három nemlineáris módon csatolt differenciálegyenlet

$$\left. \begin{aligned} \dot{x}_1 &= \sigma(x_2 - x_1) \\ \dot{x}_2 &= -x_2 + r x_1 - x_3 x_1 \\ \dot{x}_3 &= -b x_3 + x_1 x_3 \end{aligned} \right\} \quad (2.4)$$

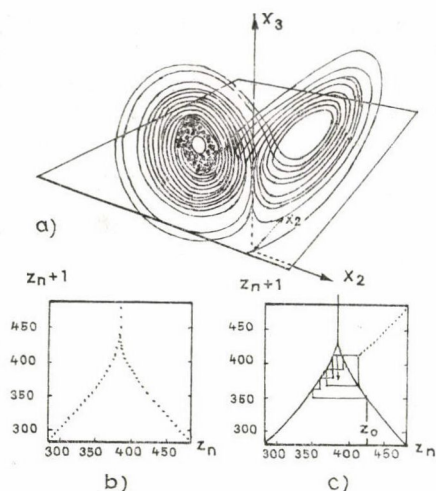
A 2.5. ábrán az ún. standard paraméter értékek mellett mutatjuk be a számítógépes úton kapott trajektóriát a tranziensek kihalása után [29, 32, 33].

A különös attraktor a 2.2b. ábrán látható felület és egy Cantor-típusú halmaz direkt szorzata. A képződmény dimenziója kettőhöz közeli szám, a rendszer ugyanis erősen disszipatív. Ennek tulajdonítható az a tény, hogy az x_3 egymást követő maximumai z_n szekvenciájának folytonos egydimenziós leképezést feleltethetünk meg [7]. Megjegyezzük, a leképezés nem analitikus maximumával kapcsolatos az, hogy a Lorenz-módelben megvalósul a káosz kialakulásának a Feigenbaum-féletől eltérő útja is (ld. [11]).

Itt jegyezzük meg, hogy a folytonos disszipatív modelleknek megfelelő diszkrét leképezések dimenziója általában egynél nagyobb.* A kaotikus átalakulás kritikus értéke körüli szűk tartományban azonban az ilyen rendszer viselkedését is visszavezethetjük egydimenziósra.

* * *

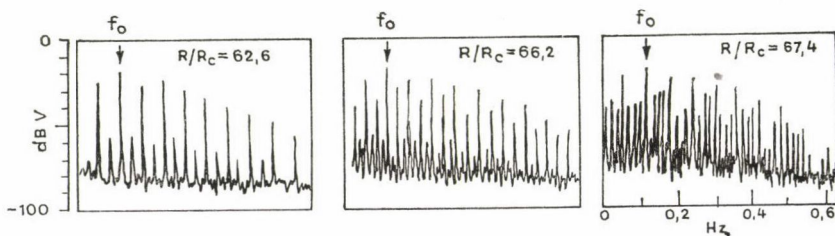
* A többdimenziós leképezésekkel kapcsolatban ld. pl. [11]. Megemlítjük, hogy a kétdimenziós leképezések egy típusánál explicit eljárás adható a különös attraktor megszerkesztésére, s annak fraktál dimenziója kiszámítható [34].



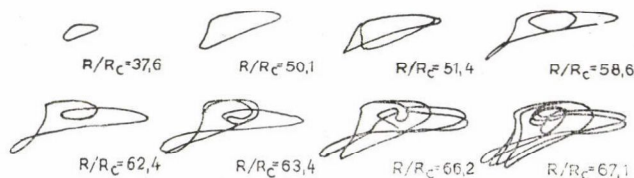
2.5a—c. ábra. Tipikus pálya a $\sigma=10$, $b=2,67$, $r=28$ paraméterek mellett (a), az $x_3(t)$ egymást követő z_n maximumainak fenomenológikus rekurziója (b), végül az illesztett egydimenziós leképezés s egy z_n szekvencia (c)

mérsékletgradiens vektor végpontjának síkvetülete periódus kettőződést mutató, *si-ma* trajektóriákat ír le.

A fentiekben megismertedtünk a káosz jellegzetes tulajdonságaival. Láttuk, a periódus kettőzések sorozata a kaotikus viselkedés kialakulásának egy tipikus kísérőjelensége. Ennek alapján a laboratóriumi kísérletek során a frekvencia spektrumból következtethetünk a káosz megjelenésére. Példaként megemlítenék egy Rayleigh—Bénard elrendezésen végzett mérést [35]. Kisméretű, téglatest alakú edénybe vizet töltöttek, s az alsó lapot melegítették. A 2.6. ábrán feltüntettünk egy-egy tipikus frekvencia spektrumot az R/R_c relatív Rayleigh-szám különböző értékei mellett, amelyet itt a kaotikus átalakulás kontrollparaméterének tekinthetünk. (Itt R_c a konvekció megindulásának kritikus értéke, ld. pl. [11]). A mérés a sok szabadsági fokú hidrodinamikai rendszer és a néhány változót tartalmazó folytonos modellek közötti analógiára utal. A kapcsolatot alátámasztja például az is, hogy egy adott helyen a hő-



2.6. ábra. A Bénard-cella közepén a hőmérsékletgradiens egy vízszintes vetületének frekvencia spektruma különböző R/R_c értékek mellett. A nyíl az alap határciklus frekvenciáját jelöli. Ennek alharmonikusai megjelenése utal a kaotikus átalakulási pont közelségére

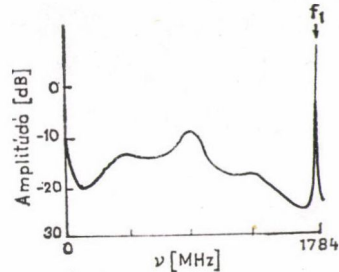


2.7. ábra. A hőmérsékletgradiens vektor végpontjának vetülete egy függőleges síkra különböző R/R_c értékek mellett

Más hidrodinamikai kísérletek (ld. [11]) során is tapasztaltak periódus kettőző bifurkációkat. A bifurkációkhoz tartozó kritikus kontrollparaméter értékek különbsége a δ szám hatványai szerint tart általában zérushoz, amely szám a rendszerek nagy többségére — a mérési hibán belül — azonos. Héliumon végzett ultrahangkísérlet során például a $\delta = 4,83 \pm 0,6$ értéket mérték [55].

A kaotikus viselkedést jellemző determinisztikus zaj a spektrumban általában megkülönböztethető a háttérzajtól, hacsak az utóbbi nem túl erős. A háttérzaj ugyanis alig módosul, ha a külső körülmények csak kevésbé változnak meg. A determinisztikus zaj intenzitása azonban erősen függ a kontrollparaméterektől, különösen az átalakulási pont környezetében. Megjegyezzük, hogy szemléletesen a determinisztikus zaj erősségét a kaotikus átalakulás rendparaméterének tekinthetjük [36, 37]. Nemlineáris áramkör egy pontján mért feszültség frekvencia spektruma látható a 2.8. ábrán [38].

A mérésekből levonhatjuk azt a következtetést, hogy sok szabadsági fokú rendszerek viselkedését a káosz és az azt kísérő instabilitások tartományában néhány változó határozza meg. A kisszámú szabadsági fokkal rendelkező folytonos modelleket vizsgálva láttuk, hogy tulajdonságaik gyakran visszavezethetők diszkrét leképezésekre. Ez a megfeleltetés különösen hasznos véletlenszerű jelenségek tanulmányozásakor.



2.8. ábra. A determinisztikus zaj spektruma. Az áramkör paramétereit változtatva a 2.4. ábrán látható spektrum h)→a) irányú megváltozásával analóg jelenséget tapasztalunk

3. DISSZIPATÍV RENDSZEREK EGY MODELLJE: AZ EGYDIMENZIÓS LEKÉPEZÉS

Az előző fejezetben láttuk, hogy a többdimenziós különös attraktoron történő mozgás véletlenszerű. Erősen disszipatív rendszerekben a kaotikus viselkedés leírásához gyakran elegendő a megfelelő nem invertálható egydimenziós leképezés sztochasztikus tulajdonságait ismernünk. Sok esetben a káosz kialakulása is nyomon követhető az egydimenziós leképezés kontrollparaméterének változtatásával. Az univerzalitás tulajdonságának mélyebb magyarázatához is eljuthatunk, ha az egydimenziós diszkrét rendszereket tanulmányozzuk.

3.1. Bifurkációk és káosz egydimenziós rendszerekben

Az egydimenziós leképezést az előző fejezetben vezettük be a (2.1) definícióval. Szemléletes eljárást mutattunk a trajektória grafikus megszerkesztésére is. Ezúttal olyan

$$x_{n+1} = f(r, x_n) \quad (3.1)$$

leképezésekkel foglalkozunk, amelyekben a dinamikai viselkedés sokféle típusa megfigyelhető az r kontrollparaméter különböző értékei mellett. Az alábbiakban a viselkedésformák egy tipikus láncolatával foglalkozunk, a kaotikus átalakulás Feigen-

baum-féle útjával [39—40]. A káosz kialakulásának ezen útja tipikus, ami alatt azt értjük, hogy a leképezések széles osztályánál megfigyelhető. Itt nem fogalmazzuk meg egzakt módon annak feltételeit, hogy egy leképezés ebbe az osztályba tartozzon. Csupán néhány forrásra hivatkozunk, amelyekben az olvasó a kérdés matematikai tárgyalását is megtalálja [41—42].

A $[0,1]$ intervallumon ható, egyetlen maximumot mutató leképezésekkel foglalkozunk. Ilyen például az

$$x_{n+1} = f_L(r, x_n) \equiv rx_n(1-x_n) \quad (3.2)$$

logisztikus leképezés, amelyet az $r \in [0,4]$ kontrollparaméter tartományban vizsgálunk. A fent említett függvényosztályba tartozónak tekinthetjük a logisztikus leképezéshez „közeli”, hozzá hasonló alakú függvényeket. Ilyen például az $f_{sn}(r, x) \equiv r \sin \pi x$ leképezés az $r \in [0,1]$ kontrollparaméter értékek mellett. Általában ide tartoznak az $f(r, x) \equiv rF(x)$ függvények az $r \in [0, 1/F(\hat{x})]$ tartományban, ahol \hat{x} az $F(x)$ egyetlen maximumhelyét jelöli és $F(0) = F(1) = 0$.

A leképezésnek x^* fixpontja, ha

$$x^* = f(r, x^*) \quad (3.3)$$

teljesül. Az x^* pontból kiindulva tehát a trajektória helyben marad. A fixponthoz közeli x_0 kezdeti értéket választva azt tapasztaljuk, az iteráció egy ideig a fixpont környezetében marad. (3.1) és (3.3) összevetéséből látható, hogy a trajektória fixponttól való távolsága közelítőleg exponenciálisan függ a lépésszámtól

$$|x_n - x^*| \approx |x_0 - x^*| e^{\lambda n}, \quad (3.4a)$$

ahol

$$\lambda = \ln \left| \frac{\partial f(r, x)}{\partial x} \right|_{x^*}. \quad (3.4b)$$

Ennek alapján instabil, marginálisan stabil és stabil fixpontokat különböztethetünk meg, aszerint, hogy $\lambda > 0$, $\lambda = 0$ vagy $\lambda < 0$. Ha a trajektóriák majdnem minden kezdeti értékre az x^* stabil fixponthoz tartanak, akkor

$$\lambda = \bar{\lambda} \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=0}^N \ln \left| \frac{\partial f(r, x)}{\partial x} \right|_{x_n} \quad (3.5)$$

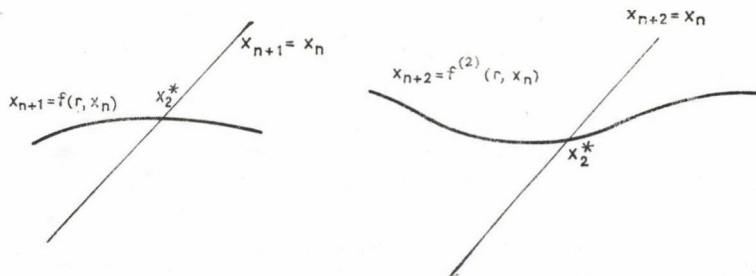
majdnem minden x_0 mellett, ahol $\bar{\lambda}$ a *Ljapunov-exponens*.

A logisztikus leképezésnek az $x_1^* = 0$ fixpontja, ha pedig $r > 1$, akkor megjelenik az $x_2^* = (r-1)/r$ fixpont is. Az előbbieket alapján belátható, az x_1^* stabil, ha $r < r_0 \equiv 1$, az x_2^* stabilitási tartománya pedig $r_0 < r < r_1 \equiv 3$. Ha $r > r_1$ az x_2^* fixpont instabillá válik. A kontrollparaméter ilyen r_1 küszöbértékét más leképezéseknél is megtaláljuk.

Mi történik az r_1 küszöb fölött? Célszerű itt bevezetnünk a később gyakran használt jelölést

$$f^{(n)}(r, x) = f(r, f(r, \dots, f(r, x) \dots)), \quad (3.6)$$

ahol a leképezést n -szer alkalmazzuk szukcesszív módon. A 3.1. ábrán felrajzoltuk az $f(r, x)$ és $f^{(2)}(r, x)$ leképezések tipikus menetét az x_2^* stabil fixpont közelében.

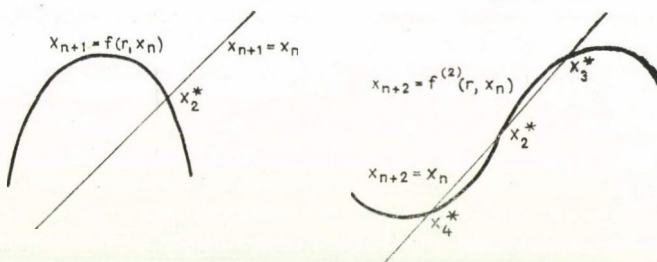


3.1. ábra. Az $f(r, x)$ és $f^{(2)}(r, x)$ az $r \gtrsim r_1$ kontrollparaméter értékek mellett

A 3.2. ábra pedig a fixpont instabillá válása utáni helyzetet mutatja vázlatosan. Az $f^{(2)}$ második iterált függvényben két újabb fixpont, x_3^* és x_4^* jelent meg, ugyanakkor x_2^* elvesztette stabilitását. Ez a jelenség példa a *bifurkációra*. A két új fixpont r_1 -hez elég közeli r kontrollparaméter értékek mellett stabil, miként az a 3.2. ábra alapján könnyen belátható. Az eredeti leképezésnek azonban ezek nem fixpontjai. Ezért az

$$x_3^* = f(r, x_4^*), \quad x_4^* = f(r, x_3^*) \quad (3.7)$$

összefüggéseknek kell teljesülniük, vagyis *határciklust* találunk. E határciklus stabilitását is a (3.5) definícióval bevezetett $\bar{\lambda}$ Ljapunov-exponenssel jellemezhetjük.



3.2. ábra. Az $f(r, x)$ és $f^{(2)}(r, x)$ leképezések az $r \gtrsim r_1$ kontrollparaméter értékek mellett

A kontrollparaméter további növelésével elérhetjük az r_2 küszöbszámot, ahol a $P=2$ periódusú határciklust jellemző $\bar{\lambda}$ Ljapunov-exponens pozitívvá, a határciklus instabillá válik. Az $f^{(2)}$ és $f^{(4)}$ leképezéseket az x_3^* vagy x_4^* környezetében felrajzolva a 3.1. és 3.2. ábrákon látható görbékhez hasonló függvényeket kapunk, attól függően, hogy $r \lesssim r_2$ vagy $r \gtrsim r_2$. Az

$$\begin{array}{c} x_3^* \rightarrow x_5^* \\ x_3^* \rightarrow x_6^* \end{array}, \quad \begin{array}{c} x_4^* \rightarrow x_7^* \\ x_4^* \rightarrow x_8^* \end{array} \quad (3.8)$$

bifurkáció során stabil $P=2^2$ periódusú határciklus jelenik meg az eredeti leképezésben ugyanakkor, amikor a $P=2$ periódusú ciklus instabillá vált.

A leképezések nagy családjára e gondolatmenet végtelen sok lépésen keresztül folytatható [43, 44]. Ily módon az r_i bifurkációs küszöbszámok egy sorozatához jutunk. E sorozat sok esetben konvergens,

$$\lim_{i \rightarrow \infty} r_i = r_\infty, \quad (3.9)$$

ahol r_∞ mellett a stabil határciklus periódusa végtelen nagy. Ezért r_∞ -t az aperiódikus, kaotikus viselkedés küszöbértékének, vagy másképpen kritikus pontnak nevezzük. A logisztikus leképezés kritikus pontjának értékét számítógéppel meghatározták, $r_\infty = 3,569\,945\,672 \dots$ (ld. pl. [45, 46]).

A fenti példákban a trajektória majdnem minden kezdeti érték esetén $P=2^k$, $k=0, 1, 2, \dots$, periódusú határciklushoz tartott. A határciklus ez esetben a rendszer periodikus *attraktora*.

* * *

A kritikus ponton túli tartományban a dinamikai viselkedés igen sokféle típusával találkozhatunk. Bizonyos kontrollparaméter értékek mellett ergodikus iterációkat generál a leképezés. Az ergodikusság tulajdonságával később részletesen foglalkozunk. Itt csupán megemlítjük, hogy ha az iteráció ergodikus, akkor az x -től függő mennyiségek trajektória menti átlaga majdnem minden x_0 kezdeti feltétel esetén előáll az x -re vett átlagként. A hely szerinti átlagolás súlyfüggvénye a stacionárius *valószínűség sűrűség* függvény, amelyet az ergodikus leképezés egyértelműen meghatároz.* Bebizonyítható például, hogy azon r kontrollparaméter értékek, amelyeknél a logisztikus leképezéshez „közeli” $f(r, x)$ függvények ergodikus iterációkat generálnak, pozitív mértékű halmazt alkotnak [49].

A sztochasztikus viselkedésnek az ergodikusságnál erősebb fokozatai is vannak (ld. pl. [50, 51]). A trajektóriákról sok esetben nemcsak azt mondhatjuk el, hogy hosszú idő elteltével valamely tartományt a stacionárius valószínűség sűrűség által meghatározott módon járnak be, hanem azt is, hogy a közel indított trajektóriák exponenciális gyorsasággal eltávolodnak egymástól. Mivel az iteráció intervallumra korlátozott, ilyenkor a trajektóriák bonyolult módon összekeverednek. Az ilyen iterációkat a csupán véges pontossággal mérni képes megfigyelő véletlenszerűnek, kaotikusnak fogja tartani. A közeli trajektóriák gyors távolodása okozza a *kezdeti feltételre mutatott érzékenységet*. Emlékeztetünk arra, hogy egyetlen attraktor létezése esetén a trajektóriák általában a kezdeti értéktől függetlenül tartanak az attraktorhoz. Ezúttal legfeljebb azt állapíthatjuk meg, a véletlenszerű mozgás milyen tartományokra korlátozódik. E tartományokat az egydimenziós leképezés különös attraktorának nevezzük.

* A valószínűség sűrűség analitikus meghatározásával később foglalkozunk. Itt a $P(x)$ sűrűség függvény egy igen szemléletes előállítását említjük meg,

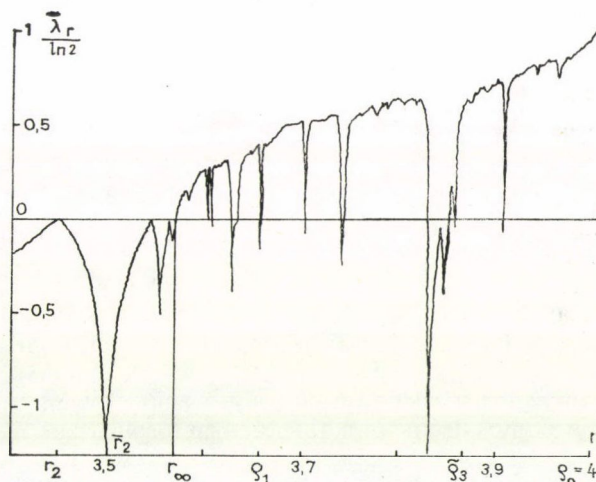
$$P(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} c_n \sum_i^{N(n)} \delta(x - p_i^{(n)}) / |f^{(n)'}(p_i^{(n)})|,$$

ahol $\{p_i^{(n)}\}_i^{N(n)}$ az $f^{(n)}(x)$ iterált leképezés összes fixpontjának halmaza, míg c_n révén a megfelelő normálásról gondoskodunk [47]. Ha az összes $p_i^{(n)}$ instabil, akkor végtelen sok pont — a megfelelő deriválttal fordítottan arányos erővel — taszítja a trajektóriát. A sztochasztikus viselkedést tulajdoníthatjuk e jelenségnek. A fenti kifejezés átlagértékek numerikus számítására jól használható [47, 48].

A kezdeti feltételre mutatott átlagos érzékenységet a $\bar{\lambda}$ Ljapunov-exponenssel jellemezhetjük. Attraktor létezése esetén láttuk, $\bar{\lambda} < 0$, közel indított trajektóriák tehát átlagosan közelednek egymáshoz. Általában olyan ergodikus iterációkat nevezünk *kaotikusnak*, amelyekhez pozitív Ljapunov-exponens tartozik.* A kaotikusság foka annál nagyobb, minél nagyobb a Ljapunov-exponens.

Használatos a kezdeti feltételre mutatott érzékenység jellemzésére a topologikus entrópia is (ld. pl. [11, 33, 50]). Előfordulhat azonban, hogy a topologikus entrópia pozitív, míg a rendszer attraktora periodikus határciklus. Szemléletesen azt mondhatjuk, a topologikus entrópiát használva figyelmen kívül hagyjuk azt a tényt, hogy a trajektória nem azonos valószínűséggel keres fel azonos Lebesgue-mértékű tartományokat. Ezért célszerűbb az ún. Kolmogorov- vagy metrikus entrópiával foglalkoznunk, amely ergodikus iterációk esetén megegyezik a Ljapunov-exponenssel [53].

A logisztikus leképezéshez tartozó $\bar{\lambda}_r$ Ljapunov-exponens r kontrollparamétértől való függését numerikus úton meghatározták (ld. pl. [41]). A 3.3. ábráról leolvashatjuk, az $r < r_\infty$ értékek mellett $\bar{\lambda}_r \leq 0$. A kaotikus átalakulás r_∞ pontján túl pedig találunk pozitív és negatív Ljapunov-exponenssel jellemezhető tartományokat is.

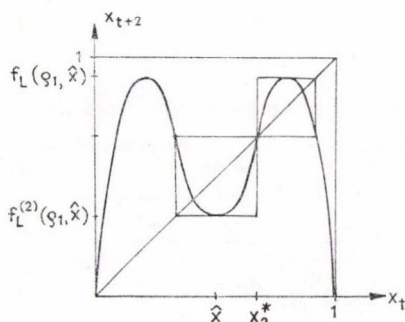


3.3. ábra. A Ljapunov-exponens a kontrollparaméter függvényében a logisztikus leképezés esetén

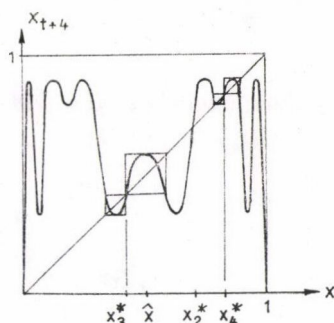
Az ábra azt mutatja, az r_∞ küszöbértéken túl periodikus és kaotikus viselkedéssel egyaránt találkozunk. Valóban, kaotikus és periodikus tartományok váltakozását figyelhetjük meg, ha a logisztikus leképezés attraktorát, ill. különös attraktorát a kontrollparaméter függvényében ábrázoljuk [54].

Felhívjuk az olvasó figyelmét arra, hogy a 3.3. és 3.4. ábrák véges számítási

* A káosz egy másik Li és Yorke által bevezetett definíciója matematikai szempontból egzakt ugyan, de ekkor a kezdeti feltételre mutatott érzékenységet a kezdőpont párok meg nem számlálható halmazára kötik ki [52]. E halmaz azonban lehet zérus mértékű. A kaotikus viselkedés ilyenkor a kísérleti megfigyelő számára legfeljebb a hosszú transziensek formájában jelentkezik, de aszimptotikusan tarthat attraktorhoz a trajektória.



3.5. ábra. A logisztikus leképezés $f_L^{(2)}(q_1, x)$ második iteráltja



3.6. ábra. Az $f_L^{(4)}(q_2, x)$ leképezés

A kontrollparamétert csökkentve az $f^{(2)}(r, x)$ görbe nem érinti többé a négyzet éleit. Elérve az $r = q_2$ értéket két-két újabb sáv jelenik meg. (A q_2 az $f^{(5)}(q_2, x) = x_4^*$ egyenletből határozható meg.) A 3.6. ábrán ezt szemléltetjük.

Itt négy különböző intervallumon figyelhetjük meg a teljesen kifejlődött káosz jelenségét. A gondolatmenet általában folytatható végtelen sok lépésen keresztül. A nagy k indexű q_k pontban a mozgás $P=2^k$ periódusú oszcilláció és kis hosszskálán teljesen kifejlődött káosz szuperpozíciója. A q_0, q_1, q_2, \dots sorozat általában konvergens, és határértéke

$$\lim_{k \rightarrow \infty} q_k = r_\infty, \quad (3.11)$$

azaz a kaotikus átalakulás küszöbértéke.

A fenti gondolatmenet általánosítható. Bebizonyítható, hogy valahányszor az \hat{x} maximumhely az instabil fixpont vagy valamely instabil határciklus egy ősképe, akkor a leképezés ergodikus [42]. Ilyenkor gyakran találunk olyan q számot, amelyre az $f^{(q)}$ leképezésben kis hosszskálán teljesen kifejlődött káosz lép fel. A sávok kettéválásának, vagy másképpen az inverz bifurkációk pontjaiban ez történik. Ha itt a kontrollparamétert kevésbé csökkentjük, illetve megnöveljük, akkor a sávok szétválnak, illetve összeolvadnak.

Előfordul azonban olyan eset is, amikor a kaotikus sávok nem érintkeznek, s a kontrollparamétert ilyenkor megfelelő irányba változtatva a sávok teljes szétetését figyelhetjük meg. Példát erre az $r = \tilde{q}_3$ kontrollparaméternél mutatunk, amelyet az a feltétel határoz meg, hogy $f^{(4)}(\tilde{q}_3, \hat{x})$ a hármas periódusú instabil határciklus egy pontja legyen. Ekkor a mozgás $P=3$ periódusú oszcilláció és kis hosszskálán teljesen kifejlődött káosz szuperpozíciója. A 3.4. ábrán láthatjuk, hogy a kaotikus mozgás intervallumai az $r = \tilde{q}_3$ pontban nem érintkeznek, $r \geq \tilde{q}_3$ értékekre viszont a három sáv megszűnik. Ilyenkor krízisről beszélünk [56].

Végezetül néhány megjegyzést teszünk a trajektóriák frekvencia spektrumáról. Periodikus attraktor létezése esetén a frekvencia spektrumot

$$\hat{c}(\omega) = |x(\omega)|^2 \quad (3.12a)$$

definiálja, ahol

$$x(\omega) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_n e^{-i\omega n}. \quad (3.12b)$$

A periódus kettőződése során a legkisebb karakterisztikus frekvencia feleződik. Az ehhez a frekvenciához és a felharmonikusaihoz tartozó csúcsok lépnek fel a spektrumban.

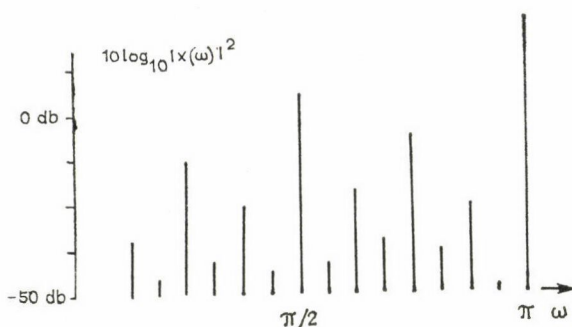
Ha a dinamikai viselkedést *különös attraktor* határozza meg, akkor a spektrum definícióján érdemes változtatni

$$\hat{c}(\omega) = c(0) + 2 \sum_{\tau=1}^{\infty} c(\tau) \cos \omega\tau, \quad (3.13a)$$

ahol $c(\tau)$ a *korrelációs függvény*

$$c(\tau) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=0}^N (x_n - \bar{x})(x_{n+\tau} - \bar{x}), \quad (3.13b)$$

$$\bar{x} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=0}^N x_n. \quad (3.13c)$$



3.7. ábra. A $P=2^6$ periódusú ciklus frekvencia spektruma a kontrollparaméter $r \lesssim r_7$ értéke mellett [41]

Amennyiben a mozgás periodikus oszcilláció és teljesen kifejlődött káosz szuperpozíciója, akkor a spektrum hasonló a 2.4e—h ábrákon láthatókhoz. A periodikus-ságra az alapprofrendencia és a felharmonikusai, a véletlenszerű viselkedésre a *zajspektrum* utal.

A — kis hosszskálán — teljesen kifejlődött káosz állapotától kevésse eltérve ugrásszerű változás lép fel: sávok olvadnak össze vagy a sávok szerkezet megszűnik. A frekvencia spektrumban ilyenkor a zaj szintje megnő, s bizonyos csúcsok eltűnnek. A *teljesen kifejlődött káosz* állapotához tartozó kontrollparaméter értékek ezért *jól mérhetőek*, többdimenziós rendszerekben is.

3.2. Skálatulajdonságok, univerzalitás

A logisztikus leképezés attraktorának, illetve különös attraktorának 3.4. ábráján látszik, az $[r_2, q_1]$ intervallumbeli kép kvalitatív módon hasonló az $[r_3, q_2]$ intervallumbelihez, csupán a jellemző hosszskála változik. A Ljapunov-exponens 3.3. ábráján is felfedezhetjük a rajz „önmagához való hasonlóság”-át. E tulajdonságot a *skálaösszefüggések* segítségével írhatjuk le. Az alábbiakban a legfontosabb, számítógéppel nyert és intuitív elméleti eredményeket ismertetjük [39, 40, 45, 46, 54, 58, 59].

A végtelen periódus kettőződést mutató leképezéseknél léteznek a

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{r_k - r_{k-1}}{r_{k+1} - r_k} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{q_{k-1} - q_k}{q_k - q_{k+1}} = \delta \quad (3.14)$$

határérték. E szám az azonos rendű maximummal rendelkező leképezések osztályán *univerzális*, például kvadratikusan maximum esetén

$$\delta = 4,669\,2016 \dots \quad (3.15)$$

A fenti limesszel ekvivalens az

$$r_\infty - r_k \propto q_k - r_\infty \propto \delta^{-k} \quad (3.16)$$

aszimptotikus arányosság. Ennek alapján az oszcilláció p periódusidejére $k \rightarrow \infty$ esetén a

$$p = 2^k \propto (r_\infty - r_k)^{-\tau} \propto (q_k - r_\infty)^{-\tau} \quad (3.17)$$

skálaösszefüggést nyerjük a

$$\tau = \ln 2 / \ln \delta \quad (3.18)$$

univerzális kritikus exponenssel.

Belátható továbbá, hogy ha az \tilde{r}_k pontok az $[r_k, r_{k+1}]$ intervallumokat azonos, k -tól független arányban osztják, akkor a Ljapunov-exponens a

$$\tilde{\lambda}_{\tilde{r}_k} \propto (r_\infty - \tilde{r}_k)^\tau \quad (3.19a)$$

$$\text{és} \quad \tilde{\lambda}_{q_k} \propto (q_k - r_\infty)^\tau \quad (3.19b)$$

hatványfüggvények szerint tart zérushoz, az r_∞ küszöbszám környezetében. A második arányosság a *Huberman—Rudnick skálareláció*, amelynek alternatív alakja

$$\tilde{\lambda}_{q_k} \approx \frac{A}{2^k}. \quad (3.20)$$

A A *univerzális amplitúdó* azonos típusú maximummal rendelkező leképezésekre azonos. E dolgozatban ismertetendő eredmények egyike a A szám közelítő meghatározása.

Eddig elsősorban a 3.4. diagram abszcisszájával kapcsolatos skálatulajdonságokat tekintettük át. Az ordináta jellemző skálatulajdonságai közül egyet említünk. Legyen \tilde{r}_k a kontrollparaméter azon értéke, amely mellett $\tilde{\lambda}_{\tilde{r}_k} = -\infty$, $\tilde{r}_k \in (r_k, r_{k+1})$. A 3.4. ábrán a szélsőérték hely körüli hasonlatosság a

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{f^{(2^k-1)}(\tilde{r}_k, \hat{x}) - \hat{x}}{f^{(2^k)}(\tilde{r}_{k+1}, \hat{x}) - \hat{x}} \right| = \lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{f^{(2^k-1)}(q_{k-1}, \hat{x}) - \hat{x}}{f^{(2^k)}(q_k, \hat{x}) - \hat{x}} \right| = \alpha \quad (3.21)$$

univerzális exponenssel írható le. A kvadratikusan maximumú leképezések osztályán

$$\alpha = 2,502\,907\,875 \dots \quad (3.22)$$

A frekvencia spektrum univerzális tulajdonságaira itt nem térünk ki, csupán néhány hivatkozást említünk [60, 61].

* * *

Az alábbiakban röviden kitérünk azokra az összefüggésekre, amelyek a δ és α számokat meghatározzák.

A kaotikus átalakulás r_∞ kritikus pontjában az attraktor végtelen periódusú határciklus. Az $f^{(2)}(r_\infty, x)$ leképezéshez tartozó attraktor szintén végtelen periódusú határciklus. Ha a második iterált függvényt az \hat{x} szélsőérték hely környezetében kinagyítjuk, az $f(r_\infty, x)$ -hez hasonló menetű leképezéshez jutunk. Feltételezzük, hogy ezt a konstrukciót ad infinitum folytatva a függvények sorozata konvergál. Csúsztassuk gondolatban az origót az (\hat{x}, \hat{x}) pontba. A $g(x)$ határérték függvényre ekkor fenn kell állnia, hogy

$$g(x) = -\alpha g(g(-x/\alpha)), \quad (3.23)$$

ahol α nagyítási faktor. Ha kikötjük, milyen maximumú legyen $g(x)$, akkor az egyenlet az α számot és egy skálafaktor erejéig a $g(x)$ függvényt meghatározza. A $g(x)$ a végtelen periódusú határciklushoz tartozó univerzális függvény.*

Levezetés nélkül közöljük, hogy adott α és $g(x)$ esetén a

$$h(x) = -\frac{\alpha}{\delta} [h(g(x/\alpha)) + g'(g(x/\alpha)) h(x/\alpha)] \quad (3.24)$$

egyenlet meghatározza a $h(x)$ függvényt — egy skálatranszformáció erejéig — és a δ számot. Ilyenkor elő kell írunk, hogy $h(x)$ maximumának rendje megegyezzen a $g(x)$ függvényével.

Más univerzális függvényeket is bevezethetünk. Érdeklődésre tarthat számot például a teljesen kifejlődött káosz univerzális függvénye. Nagyítsuk ki a 3.5. és 3.6. ábrákon látható, az $(1/2, 1/2)$ pontot tartalmazó négyzeteket egységnyi élűvé. A nagyítást a leképezés megfelelő iteráltján bármely $r = \varrho_k$ inverz bifurkációs pontban elvégezhetjük. Az eredményül kapott leképezések nagy k indexek mellett alig különböznek egymástól, s numerikus kísérletek szerint a

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \left\{ A_k \left[f_L^{(2k)} \left(\varrho_k, \hat{x} + \frac{x - \hat{x}}{A_k} \right) - \hat{x} \right] + \hat{x} \right\} = \gamma_0(x) \quad (3.25a)$$

szimmetrikus függvényhez konvergálnak, ahol

$$A_k = 1/[2f_L^{(2k)}(\varrho_k, \hat{x}) - 2\hat{x}] \quad (3.25b)$$

a nagyítás aránya [62—64]. Heurisztikus érvek szólnak amellett, hogy ha az $f_L(r, x)$ logisztikus leképezéshez „közele” $f(r, x)$ függvényeken a nagyítást és a $\varrho_k \rightarrow r_k$ átmenetet a fenti módon elvégezzük, ugyanehhez a $\gamma_0(x)$ határérték-függvényhez jutunk. Azt mondhatjuk, $\gamma_0(x)$ a kvadratikus maximumú leképezések osztályán univerzális. A $\gamma_0(x)$ teljesen kifejlődött káoszhoz vezet, s megmutatható, hogy a λ_{ϱ_k} Ljapunov-exponens aszimptotikus viselkedését jellemző A univerzális amplitúdó (ld. (3.20)) éppen az

$$x_{n+1} = \gamma_0(x_n) \quad (3.26)$$

itárcióhoz tartozó Ljapunov-exponens.

* A $g(x)$ univerzális függvény szokásos elnevezése *fixpont függvény*. A kifejezés arra utal, hogy a függvénytéren definiálható renormálási transzformációval szemben $g(x)$ invariáns [39, 40].

Az univerzalitás elmélete iránt érdeklődő olvasó számára a [11, 63, 65] tanulmányokat ajánljuk.

Az egydimenziós leképezéseknél megfigyelhető skálaviselkedést néhány olyan szám és függvény jellemzi, amelyek az azonos rendű maximummal rendelkező leképezések osztályán *univerzálisak*. Ily módon mélyebb magyarázatát nyertük azon *univerzális viselkedésnek*, amely *többdimenziós* rendszerek kaotikus átalakulási pontja környezetében tapasztalható (ld. a 2. fejezetet). Ha a többdimenziós rendszerben a káosz kialakulásának Feigenbaum-féle útja valósul meg, akkor a megfelelő egydimenziós leképezés maximumának rendje meghatározza a (2.3) hányados aszimptotikus értékét. Az idézett méréseket annak *kísérleti igazolásának* tekinthetjük, hogy a különös attraktoron való mozgás általában *sima, kvadrátikus maximumú* egydimenziós leképezéssel írható le.*

4. A TELJESEN KIFEJLŐDÖTT KÁOSZ EGYDIMENZIÓS RENDSZEREKBEN

4.1. A master egyenlet

Az előző fejezetben az egydimenziós leképezések dinamikai tulajdonságait tanulmányoztuk a kontrollparaméter különböző értékei mellett. A mozgás típusai közül kiválasztjuk a teljesen kifejlődött kaotikus viselkedést, s a dolgozat hátralevő részét e jelenség vizsgálatának szenteljük. Mint arról korábban már volt szó, teljesen kifejlődött káosz lép fel kis hosszskálán, ha a leképezés megfelelő iteráltját tekintjük a sávok kettéválásának helyén és a krízis-pontokban. Ilyen viselkedést tapasztalunk több kontrollparamétert tartalmazó rendszerekben is [67, 68]. Teljesen kifejlődött káosz és determinisztikus diffúzió szuperpozícióját figyelhetjük meg a számegegyenesen értelmezett leképezésekben [69]. A hosszegység alkalmas megválasztásával a teljesen kifejlődött káoszhoz vezető leképezéseket a

4.1. ábrán látható alakra hozhatjuk.

$$x_{n+1} = f(x_n) \quad (4.1)$$

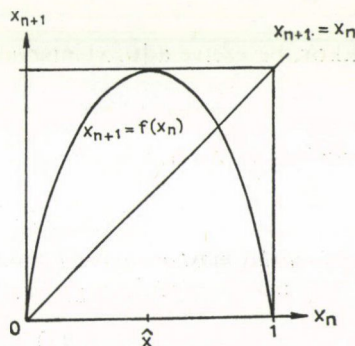
leképezés függvénye folytonos, egyetlen maximummal rendelkezik az \hat{x} helyen,

$$f(\hat{x}) = 1, \quad (4.2)$$

teljesül

$$f(0) = f(1) = 0, \quad (4.3)$$

$$f'(0) \geq 1, \quad (4.4)$$



4.1. ábra. Teljesen kifejlődött káoszhoz vezető leképezés

* Előfordulnak ez alól kivételek. Ilyenre példa a 2.5c. ábrán látható Lorenz-leképezés, s nem analitikus maximumú leképezés felel meg bizonyos elektronikai [11] és kémiai [66] rendszereknek.

valamint $f(x)$ néhány izolált ponttól eltekintve differenciálható. További feltétel, hogy a leképezés ergodikus legyen, azaz egyértelműen létezzék olyan $P_f(x)$ valószínűség sűrűség függvény, amelynek segítségével egy $h(x)$ függvény trajektória menti átlaga a

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=0}^N h(x_n) = \int_0^1 P_f(x) h(x) dx \quad (4.5)$$

alakban írható fel. A leképezés ergodikus, ha például $1/\sqrt{|f'(x)|}$ konvex függvény, vagyis ha $f(x)$ Schwarz-deriváltja negatív [42].

A valószínűség sűrűség *stacionárius*, azaz (4.5) alapján fennáll

$$\int_0^1 h(x) P_f(x) dx = \int_0^1 h(f(x)) P_f(x) dx. \quad (4.6)$$

Az egyenlőségnek minden olyan $h(x)$ függvényre teljesülnie kell, amelyre az integrálok léteznek. A $P_f(x)$ valószínűség sűrűséget (4.6) meghatározza.

Ha $h(x) = \delta(x-y)$, akkor (4.6) a

$$P_f(y) = \frac{P_f(x_1)}{|f'(x_1)|} + \frac{P_f(x_2)}{|f'(x_2)|} \quad (4.7)$$

formát ölti (ld. pl. [41]), ahol

$$f(x_1) = f(x_2) = y, \quad (4.8a)$$

$$y < 1. \quad (4.8b)$$

A stacionáriusság követelményének egy másik, az előzővel ekvivalens alakjához jutunk a $h(x) = \theta(y-x)$ választással, ahol

$$\theta(z) = \begin{cases} 0, & \text{ha } z < 0 \\ 1, & \text{ha } z > 0 \end{cases}. \quad (4.9)$$

Ekkor, bevezetve a $[0, x]$ intervallum

$$\mu_f(x) = \int_0^x P_f(z) dz \quad (4.10)$$

invariáns mértékét, a

$$\mu_f(y) = \mu_f(x_1) + 1 - \mu_f(x_2), \quad x_1 \leq 1/2 \leq x_2, \quad (4.11a)$$

stacionárius master egyenlet adódik, ahol (4.8a) teljesül.

A master egyenletet gyakran célszerű a

$$\mu_f(x) = 1 + \mu_f(f_l^{-1}(x)) - \mu_f(f_u^{-1}(x)) \quad (4.11b)$$

formában felírni, ahol f_l^{-1} és f_u^{-1} a 4.2. ábra szerint a leképezés inverzének alsó, illetve felső ágát jelöli.

A későbbiek során hallgatólagosan feltesszük, a master egyenlet abszolút folytonos megoldása egyértelműen létezik, és ezután ezt nevezzük invariáns mértéknek.

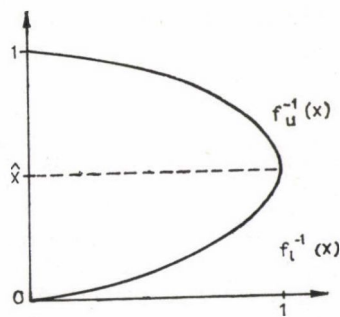
A trajektóriák kaotikusságának fokát méri a *Ljapunov-exponens*, amelyet (3.5) és (4.5) alapján a

$$\bar{\lambda}_f = \int_0^1 P_f(x) \ln |f'(x)| dx \quad (4.12)$$

integrállal állíthatunk elő. Használhatjuk az iteráció véletlenszerűségének jellemzésére a *korrelációs függvényt* is, amely (3.13) és (4.5) szerint a

$$c_f(\tau) = \int_0^1 (x - \bar{x})(f^{(\tau)}(x) - \bar{x}) P_f(x) dx, \quad (4.13a)$$

$$\bar{x} = \int_0^1 x P_f(x) dx. \quad (4.13b)$$



4.2. ábra. A teljesen kifejlődött káoszhoz vezető $f(x)$ leképezés inverze

alakot ölti. Gyakran vizsgálják a *frekvencia spektrumot* is:

$$\hat{c}_f(\omega) = c_f(0) + 2 \sum_{\tau=1}^{\infty} c_f(\tau) \cos \omega \tau. \quad (4.13c)$$

A trajektóriák sztochasztikus viselkedését a $P_f(x)$ valószínűség sűrűség, illetve a $\mu_f(x)$ invariáns mérték teljesen leírja. A továbbiakban a (4.11) *master egyenlet megoldásával*, azaz e függvények meghatározásával foglalkozunk. Célunk még a kaotikusság jellemző mennyiségeinek, a Ljapunov-exponensnek és a korrelációs függvénynek a kiszámítása is.

4.2. Ekvivalens leképezések

Tegyük fel, hogy ismerjük az

$$x_{n+1} = f(x_n) \quad (4.14)$$

iterációhoz tartozó $\mu_f(x)$ invariáns mértéket, s keressük az

$$y_{n+1} = g(y_n) \quad (4.15)$$

leképezésnek megfelelő $\mu_g(y)$ függvényt. Ha találunk olyan, a $[0, 1]$ intervallumon egy-egyértelmű, abszolút folytonos $u(y)$ függvényt, amely a két leképezést a

$$g(y) = u^{-1}(f(u(y))) \quad (4.16)$$

módon köti össze, akkor

$$\mu_g(y) = \mu_f(u(y)). \quad (4.17)$$

Ekkor azt mondjuk, az f és g leképezések egymással metrikusan ekvivalensek, vagy másképpen, konjugált leképezések.

Megemlítjük, ha (4.16) teljesül, viszont az egy-egyértelmű $u(y)$ koordináta-transzformáció nem abszolút folytonos, akkor a leképezések között csupán topológus ekvivalencia áll fenn. A teljesen kifejlődött káoszhoz vezető leképezések

topologikusan hasonlóak — ezt tükrözi az azonosan $\ln 2$ topologikus entrópia —, a metrikus ekvivalencia segítségével pedig e családon belül definiálhatunk ekvivalencia osztályokat. A dinamikai viselkedés „fizikai” szempontból a metrikusan ekvivalens leképezéseknél hasonló. Ezért ekvivalencia alatt az elkövetkezőkben mindig metrikus hasonlóságot értünk. Ilyenkor elegendő egy ekvivalencia osztály egyetlen reprezentánsához tartozó invariáns mértéket ismerni ahhoz, hogy az osztály összes többi elemének sztochasztikus tulajdonságait leírassuk.

Példaként az

$$f_H(x) = 1 - |1 - 2x| \quad (4.18)$$

*háztető leképezés*hez tartozó ekvivalencia osztályt mutatjuk be. A háztető leképezéshez tartozó invariáns mérték a

$$\mu_H(x) \equiv x \quad (4.19)$$

Lebesgue-mérték. Amennyiben a g leképezésre teljesül (4.16), azaz f_H és g metrikus értelemben ekvivalensek, akkor

$$\mu_g(x) = u(x). \quad (4.20)$$

Az

$$f_L(4 \cdot x) \equiv f_L(x) = 4x(1-x) = 1 - (1-2x)^2 \quad (4.21)$$

logisztikus leképezést például az

$$u(x) = \frac{2}{\pi} \arcsin \sqrt{x} \quad (4.22)$$

abszolút folytonos koordinátatranszformáció köti össze a háztető leképezéssel [70]. Az invariáns mérték (4.20) szerint ugyanez a függvény, és a valószínűség sűrűség (4.10) alapján

$$P_L(x) = \frac{1}{\pi \sqrt{x(1-x)}}. \quad (4.23)$$

A vizsgált f_L és f_H leképezések és a hozzájuk tartozó P_L és P_H valószínűség sűrűségek szimmetrikusak az $\hat{x}=1/2$ pontra nézve. Ilyen esetben *kettősen szimmetrikus leképezésekről* beszélünk. Ezúttal az $u(x)$ koordinátatranszformáció ferde szimmetriát mutatott az $(1/2, 1/2)$ pontra.

Általában belátható, hogy ekvivalens szimmetrikus leképezések között *ferdén szimmetrikus* $u(x)$ transzformáció teremt kapcsolatot. Igaz továbbá, hogy ha egy leképezés konjugált az f_H háztető leképezéshez, akkor az vagy kettős szimmetriát mutat, vagy mindkét szimmetria sérül [45]. Az is bizonyítható, hogy minden kettősen szimmetrikus leképezés ekvivalens az f_H háztető leképezéssel.

Az ekvivalens leképezésekhez tartozó Ljapunov exponensek megegyeznek [11]. Ezért a kettős szimmetriát mutató leképezések Ljapunov-exponense azonos az f_H háztető leképezéshez tartozóval:

$$\lambda_H = \ln 2. \quad (4.24)$$

Az utóbbit (4.12) és (4.18) felhasználásával számítottuk ki.

Kimondható az a tétel, mely szerint kettősen szimmetrikus leképezéseknek δ_{τ_0} -val arányos korrelációs függvény felel meg [45]. A frekvencia spektrum ilyenkor

fehér zajt jelez. A konjugálás a $\tau=0$ időhöz tartozó amplitúdót azonban nem hagyja változatlanul. A háztető leképezésnél például

$$c_H(\tau) = \frac{1}{12} \delta_{\tau 0}, \quad (4.25a)$$

míg a logisztikus esetben

$$c_L(\tau) = \frac{1}{8} \delta_{\tau 0} \quad (4.25b)$$

(ld. pl. [11]). A korrelációs függvény (4.13a) kifejezésből látszik, konjugált leképezések korrelációs függvényei általában különböznek egymástól.

4.3. Aszimmetrikus leképezések szimmetrizálása

4.3.1. A szimmetrizálási eljárás

Az ezután következő fejezetekben az $\hat{x}=1/2$ pontra nézve szimmetrikus, teljesen kifejlődött káoszt generáló leképezéseket vizsgálunk. Ez nem jelent lényeges megszorítást, ugyanis, mint azt alább bemutatjuk, az aszimmetrikus leképezések általában szimmetrikussá tehetőek nem invertálható függvénnyel végzett konjugálás alkalmazásával.

Legyen $g(x)$ aszimmetrikus leképezés, amelynek maximumhelye $\hat{x}_g \neq 1/2$. Keresünk olyan $u(x)$, a $[0, 1]$ intervallumon invertálható függvényt, amellyel az x koordinátát transzformálva az

$$f(x) = u^{-1}(g(u(x))) \quad (4.26)$$

szimmetrikus leképezéshez jutunk. Ehhez elegendő, hogy a

$$g(u(x)) \equiv h(x) \quad (4.27)$$

függvény szimmetrikus legyen. A $h(x)$ egyetlen maximummal rendelkezik, $h(1/2)=1$, és $h(0)=h(1)=0$. Az u transzformáció formálisan felírható az

$$u(x) = g^{-1}(h(x)) \quad (4.28)$$

alakban. A teljesen kifejlődött káoszhoz vezető leképezések inverzének az 4.2. ábra szerint két ága van. A (4.28) kifejezésben $x \leq 1/2$ esetén az alsó ágot, azaz g_l^{-1} -et, $x \geq 1/2$ mellett pedig a felső ágot, azaz a g_u^{-1} függvényt kell használni.

A (4.26) és (4.28) kifejezéseket összevetve látszik, a szimmetrikus leképezés előáll az

$$f(x) = h^{-1}(g(h(x))) \quad (4.29)$$

alakban. A h inverzei közül h_l^{-1} veendő, ha $h(x) \leq \hat{x}_g$, és h_u^{-1} -et alkalmazzuk, ha $h(x) \geq \hat{x}_g$.*

* Megjegyezzük, nem invertálható függvénnyel végzett koordinátatranszformációk lényeges szerepet játszanak a több kontrollparamétert tartalmazó leképezések dualitási tulajdonságainak feltérképezésében. Ilyen rendszerek gyakran mutatnak multikritikus viselkedést [68].

Az f és g leképezésekhez tartozó invariáns mérték függvények között fennáll

$$\mu_f(x) = \mu_g(u(x)) = \mu_g(g^{-1}(h(x))), \quad (4.30)$$

azaz a h transzformáció és a szimmetrikus f leképezés invariáns mértékének ismeretében az aszimmetrikus g leképezéshez tartozó invariáns mérték meghatározható.

Tegyük fel, hogy g maximumát egyetlen kitevő jellemzi, függetlenül attól, az \hat{x}_g pontot jobbról vagy balról közelítjük-e meg. Ekkor általában célszerű olyan f szimmetrikus leképezéssel való ekvivalenciát keresni, amely maximumának rendje g -ével azonos. Vizsgáljuk meg, milyen követelményt ró ki e feltétel a h transzformációra.

Az (4.28) kifejezés alapján látható, hogy $u(1/2) = \hat{x}_g$. Feltéve az

$$u(x) \approx 1 - (1-x)^\beta, \quad x \rightarrow 1-0, \quad (4.31a)$$

$$u(x) \approx \hat{x}_g - \gamma \left(\frac{1}{2} - x \right)^\delta, \quad x \rightarrow \frac{1}{2} - 0, \quad (4.31b)$$

$$g(x) \approx 1 - \varepsilon (\hat{x}_g - x)^k, \quad x \rightarrow \hat{x}_g - 0 \quad (4.31c)$$

aszimptotikus formulákat, (4.26)-ból

$$f(x) \approx 1 - \left[\frac{\varepsilon}{\alpha} \gamma^k \left(\frac{1}{2} - x \right)^{\delta \cdot k} \right]^{1/\beta}, \quad x \rightarrow \frac{1}{2} - 0 \quad (4.32)$$

adódik. Ha tehát

$$\delta = \beta, \quad (4.33)$$

akkor f és g maximumának rendje *megegyezik*. Ez teljesíthető a $\beta = \delta = 1$ számokkal, amit elérhetünk, ha h maximumának rendje is k , miként az (4.28)-ból könnyen belátható.

A szimmetrizálást tehát érdemes g -ével *azonos rendű maximummal* rendelkező h transzformációval végezni. Ilyen esetben is előfordulhat azonban, hogy $u(x)$ az $\hat{x}_f = 1/2$ helyen megtörik, ha csak g nem szimmetrikus a maximumának kis környezetében.

4.3.2. Példa a szimmetrizálásra

Az alábbiakban példát mutatunk a szimmetrikus és az aszimmetrikus leképezések egy-egy konkrét családja közötti metrikus ekvivalenciára.

Tekintsük az olyan g aszimmetrikus leképezéseket, amelyeket inverzeikkel adunk meg

$$g_l^{-1}(x) = \frac{x}{2} + V(x), \quad (4.34a)$$

$$g_u^{-1}(x) = 1 - \frac{x}{2} + V(x), \quad (4.34b)$$

ahol $V(x)$ legyen (abszolút) folytonos és $V(0) = 0$. A g leképezés egyértékűsége miatt $|V'(1)| \leq 1/2$, fennáll továbbá $|V'(0)| \leq 1/2$. A g maximumhelye $\hat{x}_g = 1/2 + V(1)$, ezért teljesülnie kell a $|V(1)| < 1/2$ egyenlőtlenségnek.

A g maximuma lineáris, ezért kézenfekvőnek látszik a

$$h(x) = 1 - |2x - 1| \equiv f_H(x) \quad (4.35)$$

háztető leképezést használni a (4.29) transzformációban. Ezúttal az f szimmetrikus leképezés inverz függvényét adjuk meg:

$$f_{l,u}^{-1}(x) = h_{l,u}^{-1}(g^{-1}(h(x))), \quad (4.36)$$

ahol g_l^{-1} , ill. g_u^{-1} alkalmazandó aszerint, hogy $x \leq 1/2$ vagy $x \geq 1/2$. Az f^{-1} inverz f_l^{-1} alsó ágát vizsgáljuk. Ekkor a (4.35) leképezést invertálva, s a (4.34) alakokat használva kapjuk (4.36)-ból

$$f_l^{-1}(x) = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{1}{2}[x + V(2x)], & 0 \leq x \leq 1/2 \\ \frac{1}{2}[x + V(2-2x)], & 1/2 \leq x \leq 1 \end{array} \right\}. \quad (4.37)$$

Vezessük be a szimmetrikus

$$S(x) = \left\{ \begin{array}{ll} V(2x), & 0 \leq x \leq 1/2 \\ V(2-2x), & 1/2 \leq x \leq 1 \end{array} \right\} \quad (4.38)$$

függvényt. A (3.34) *aszimmetrikus leképezésnek* tehát a háztető függvény, mint nem invertálható koordinátatranszformáció, az

$$f_l^{-1}(x) = \frac{1}{2}(x + S(x)), \quad S(x) = S(1-x) \quad (4.39)$$

típusú *szimmetrikus leképezést* felelteti meg.

Az f és g leképezéseket jellemző invariáns mérték függvények között (4.30) alapján a

$$\mu_f(x) = \mu_g(x + S(x)) \quad (4.40)$$

kapcsolatot találjuk.

Bár a szimmetrizálási eljárást itt azért vezettük be, hogy aszimmetrikus leképezések sztochasztikus tulajdonságait szimmetrikusakéira vezessük vissza, a gondolatmenet megfordítva is alkalmazható.

Fenti példánkban az aszimmetrikus g leképezéshez tartozó invariáns mértéket közvetlenül meghatározhatjuk:

$$\mu_g(x) \equiv x. \quad (4.41)$$

Valóban, a (4.34) definíció szerint

$$1 + g_l^{-1}(x) - g_u^{-1}(x) = x, \quad (4.42)$$

azaz a (4.11b) master egyenletnek (4.41) megoldása. Feltesszük, hogy a (4.34)-beli $V(x)$ olyan g leképezést definiál, amelyhez egyértelmű invariáns mérték tartozik. Ennek alapján, (4.40) szerint, a (4.39) képlettel definiált f leképezés invariáns mértéke

$$\mu_f(x) = x + S(x). \quad (4.43)$$

Az f szimmetrikus leképezés sztochasztikus tulajdonságait részletesen a 9. fejezetben fogjuk vizsgálni, konkrét $S(x)$ függvények esetén is.

4.4. A valószínűség sűrűség függvény szimmetriájának egy szükséges feltétele

Az általánosság megszorítása nélkül foglalkozhatunk ezentúl szimmetrikus leképezésekkel. Az alábbiakban megmutatjuk, a megfelelő valószínűség sűrűség függvény általában *nem szimmetrikus*.

A (4.11a) master egyenletet szimmetrikus leképezések esetén a

$$\mu_f(f(x)) = 1 \pm \mu_f(x) \mp \mu_f(1-x) \quad (4.44)$$

alakba írhatjuk, ahol aszerint kell a felső vagy alsó előjelet figyelembe venni, hogy $x \leq 1/2$ vagy $x \geq 1/2$.

Tegyük fel, hogy a leképezés az $x=0$ és az $x=\hat{x}=1/2$ pontok környezetében az

$$f(x) \approx cx^j, \quad x \rightarrow 0 \quad (4.45a)$$

$$f(x) \approx 1 - a|x - 1/2|^k, \quad x \rightarrow 1/2 \quad (4.45b)$$

kifejezésekkel közelíthető. Ekkor a (4.44) master egyenlet alapján meghatározhatjuk az invariáns mérték *aszimptotikus viselkedését*. Az $x=1$ pont környezetében

$$\mu_f(x) \approx 1 - 2P_f(1/2) \left(\frac{1-x}{a} \right)^{1/k}, \quad x \rightarrow 1. \quad (4.46)$$

Megjegyezzük, ha a mérték az $x=1/2$ helyen nem deriválható, akkor itt a

$$P_f(1/2) = [\mu'_f(1/2-0) + \mu'_f(1/2+0)]/2 \quad (4.47)$$

definícióval élünk. Az origó környékén meg kell különböztetnünk néhány esetet. Amennyiben $j < 1$, akkor

$$\mu_f(x) \approx \frac{2P_f(1/2)}{c^{1/kj} a^{1/k}} x^{1/kj}, \quad x \rightarrow 0. \quad (4.48)$$

Ha $j=1$, akkor $c=f'(0)$. Legyen $f'(0) > 1$, ekkor fennáll

$$\mu_f(x) \approx \frac{2P_f(1/2)}{a^{1/k}([f'(0)]^{1/k} - 1)}, \quad x \rightarrow 0. \quad (4.49)$$

Abban az esetben pedig, ha $f'(0)=1$, csak annyit mondhatunk, hogy a mérték kezdeti hatványviselkedését $1/k$ -nál kisebb exponens jellemzi. A megfelelő amplitudó nem határozható meg, amíg a master egyenletet csupán az aszimptotikus tartományban vizsgáljuk.*

A fentiek alapján elmondhatjuk, az invariáns mérték csak akkor lehet ferdén szimmetrikus, ha a leképezés maximumának k rendszámára és az $f'(0)$ kezdeti deriváltra teljesül

$$f'(0) = 2^k. \quad (4.50)$$

Ez egyben a valószínűség sűrűség szimmetriájának egy *szükséges feltétele*. A szimmetrikus leképezések többségére azonban a feltétel *nem áll fenn*.

* A $j > 1$ és a $j=1$, $f'(0) < 1$ esetekben a trajektória nem járja be a teljes $(0, 1)$ intervallumot. Megjegyezzük továbbá, a levezetés során feltettük, $P_f(1/2)$ és $1/P_f(1/2)$ véges számok. Ez általában így is van, ezért a szimmetria feltétel általánosítására itt nem térünk ki.

5. A PROBLÉMA

Szimmetrikus, teljesen kifejlődött káoszhoz vezető leképezések sztochasztikus tulajdonságait kívánjuk leírni. Ha találunk olyan abszolút folytonos koordináta-transzformációt, amely a vizsgált leképezést összeköti a háztető leképezéssel, akkor a keresett valószínűség sűrűség meghatározható. Ilyenkor a sűrűség függvény szükségképpen szimmetrikus. Láttuk azonban, a valószínűség sűrűsége felírt (4.50) szimmetria feltétel csupán speciális esetekben teljesül, a sűrűség függvény tipikusan nem szimmetrikus. Innen következik, hogy a szimmetrikus leképezések általában metrikus értelemben nem ekvivalensek a háztető és a logisztikus leképezéssel. A konjugálás egyszerű módszere tehát általában nem alkalmazható a valószínűség sűrűség meghatározására.

Numerikus kísérletek utalnak arra, hogy tipikus, szimmetrikus polinom leképezések olyan trajektóriákat generálnak, amelyek sztochasztikus jellemzői csupán kismértékben térnek el a kettősen szimmetrikus leképezésekhez tartozóktól. Így például a Ljapunov-exponens, azaz a metrikus entrópia általában

$$\lambda_f \lesssim \ln 2, \quad (5.1)$$

és a korrelációs függvényben — viszonylag kis amplitúdóval ugyan — megjelennek a $\tau=1, 2, \dots$ időkhöz tartozó csúcsok [45, 47, 54, 56, 62, 64, 71].

Célunk olyan eljárás kidolgozása, melynek révén analitikus módon számíthatjuk a valószínűség sűrűség függvényt nem kettősen szimmetrikus leképezések esetén is. Szeretnénk továbbá megmagyarázni a Ljapunov-exponensre és a korrelációs függvényre vonatkozó numerikus mérési eredményeket.

A következőkben egy analitikus és egy numerikus közelítő módszert mutatunk be, végül néhány egzaktul megoldható esetet vizsgálunk.

6. A SZTOCHASZTIKUS VISELKEDÉS LEÍRÁSA PERTURBATÍV ÚTON

6.1. A valószínűség sűrűség függvény analitikus közelítése

6.1.1. A korrekciók meghatározásának általános módszere

Kísérjük meg gondolatban a (4.44) master egyenletet először oly módon megoldani, hogy feltesszük, a $\mu_f(x)$ invariáns mérték előállítható az $1-2x$ változó különböző kitevőjű hatványainak lineárkombinációjaként. Általában ilyenkor kiderül, hogy $\mu_f(x)$ -t végtelen sor alakjában kell keresnünk. A master egyenletet sorbafejtve pedig azt látjuk, a mérték sorában fellépő ismeretlen együtthatókra felírható valamennyi egyenletben az együtthatók közül végtelen sok lép fel. Ilyen egyenletek nehezen oldhatóak meg. Szükségesnek látszik olyan új paraméter bevezetése, amelynek segítségével $\mu_f(x)$ sorát megfelelően *átrendezhetjük*.

Tekintsük az $f(\varepsilon, x)$ szimmetrikus leképezést. Legyen ε kis paraméter, s az

$$f(\varepsilon, x) = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k f_k(x) \quad (6.1)$$

sor konvergáljon. Kívánjuk meg, hogy

$$f_k(x) = f_k(1-x), \quad (6.2a)$$

valamint

$$f_k(0) = f_k(1/2) = 0, \quad k \geq 1. \quad (6.2b)$$

Tételezzük fel, hogy a megfelelő valószínűség sűrűség és az invariáns mérték egyértelműen létezik és analitikus módon függ ε -tól:

$$P(\varepsilon, x) = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k P_k(x), \quad (6.3a)$$

$$\mu(\varepsilon, x) = \int_0^x P(\varepsilon, y) dy = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k \mu_k(x), \quad (6.3b)$$

ahol $\mu_k(0) = \mu_k(1) = 0$, ha $k \geq 1$. A nulladrendű $P_0(x)$ és $\mu_0(x)$ függvények legyenek ismertek.

A (4.44) master egyenlet ezúttal a

$$\mu(\varepsilon, f(\varepsilon, x)) = 1 \pm \mu(\varepsilon, x) \mp \mu(\varepsilon, 1-x), \quad x \leq 1/2 \quad (6.4)$$

alakot ölti. Fejtsük sorba az egyenletet ε hatványai szerint és gyűjtsük össze a megfelelő együtthatókat. Ily módon egyenleteket kapunk a mérték korrekcióira. A $\mu_k(x)$ korrekciót a

$$\boxed{\mu_k(f_0(x)) = F_k(f_0(x)) \pm \mu_k(x) \mp \mu_k(1-x), \quad x \geq 1/2} \quad (6.5)$$

egyenletből határozhatjuk meg. Itt $F_0(x) \equiv 1$, és $k \geq 1$ indexre $F_k(x)$ az f_0, f_1, \dots, f_k és a $\mu_0, \mu_1, \dots, \mu_{k-1}$ függvényekkel kifejezhető. Az $F_k(x)$ függvény általános alakját az A. Függelékben adjuk meg. A (6.5) egyenlet (6.4)-nél annyiban egyszerűbb, hogy a bal oldalon az argumentumban $f(\varepsilon, x)$ helyett $f_0(x)$ szerepel. A jobb oldal azonban bonyolultabb lett, az 1-es helyét az $F_k(f_0(x))$ függvény foglalta el. A későbbiek során látni fogjuk, a bal oldal egyszerűsödése gyakran több könnyítést jelent, mint amennyi nehézséget okoz az $F_k(f_0(x))$ függvények megjelenése.

Könnyű belátni, hogy (6.5) megoldása, ha létezik, egyértelmű. Tudjuk ugyanis, hogy a nulladrendű invariáns mérték a megfelelő master egyenlet egyértelmű megoldása. Vegyük észre, hogy ha két olyan függvényt találunk, amelyek (6.5) (abszolút folytonos) megoldásai, akkor $\Delta\mu_k(x)$ különbségük eleget tesz a

$$\Delta\mu_k(f_0(x)) = \pm \Delta\mu_k(x) \mp \Delta\mu_k(1-x), \quad x \geq 1/2, \quad (6.6)$$

egyenletnek. A nulladrendű megoldás egyértelműsége miatt azonban ennek $\Delta\mu_k(x) \equiv 0$ az egyedüli (abszolút folytonos) megoldása.

Először az *elsőrendű korrekció* meghatározásával foglalkozunk. Ha $k=1$, akkor (6.5)

$$\mu_1(f_0(x)) = -f_1(x)P_0(f_0(x)) \pm \mu_1(x) \mp \mu_1(1-x),$$

$$x \geq 1/2 \quad (6.7)$$

alakú. Bontsuk fel a mérték korrekcióját a következő módon

$$\mu_1(x) = P_0(x)[S_1(x) + T_1(x)], \quad (6.8)$$

ahol

$$S_1(x) = S_1(1-x) \quad (6.9a)$$

és

$$T_1(x) = -T_1(1-x). \quad (6.9b)$$

A felbontás egyértelmű. E szétválasztás alapján a leképezés első korrekciójának *egyértelmű*

$$f_1(x) = f_1^c(x) + f_1^{nc}(x) \quad (6.10a)$$

felbontásához jutunk, ahol

$$f_1^c(x) = f_0'(x)T_1(x) - T_1(f_0(x)), \quad (6.10b)$$

és

$$f_1^{nc}(x) = -S_1(f_0(x)) + S_1(x)f_0'(x) \frac{P_0(x) - P_0(1-x)}{P_0(x) + P_0(1-x)}. \quad (6.10c)$$

A levezetéshez felhasználtuk a (6.8) egyenletet, s a nulladrendű leképezéssel kapcsolatos átalakításoknál alkalmaztuk (4.7)-et.

Belátható a 4.2. fejezetben elmondottak alapján, hogy ha

$$f_1(x) = f_1^c(x) \quad (6.11a)$$

akkor az $f(\varepsilon, x)$ és az $f_0(x)$ leképezések $0(\varepsilon)$ rendig konjugált leképezések. A konjugáló függvény ekkor

$$u(\varepsilon, x) = x - \varepsilon T_1(x) + O(\varepsilon^2). \quad (6.11b)$$

Ennek alapján a $\mu_1(x)$ korrekció (6.8) szerinti, az $f_1(x)$ (6.10) szerinti felbontását konjugált, illetve nem konjugált részekre való szétválasztásként értelmezhetjük. Erre utalnak a c és nc felső indexek.

Az $f_1(x)$ korrekció egyértelmű (6.10) felbontásának elvégzésével a mérték $\mu_1(x)$ korrekciója (6.8)–(6.9) alapján meghatározható. Általában azonban a (6.10) szétválasztást nem könnyű megtalálni. A helyzet lényegesen egyszerűsödik, ha a nulladrendű leképezés kettős szimmetriát mutat, azaz ha

$$P_0(x) = P_0(1-x). \quad (6.12)$$

Ekkor az

$$f_1(x) = T_1(x)f_0'(x) - T_1(f_0(x)) - S_1(f_0(x)) \quad (6.13)$$

felbontás elvégzésére redukálódik a feladat. Példát erre a 6.2. fejezetben mutatunk.

* * *

Magasabb rendben hasonló módon járhatunk el. Alkalmazásaink szempontjából azok az esetek jelentősek, amelyeknél a nulladrendű leképezés kettősen szimmetrikus. Ilyenkor a mérték ferdén szimmetrikus része teljes egészében konjugálásból származónak tekinthető. A k -adik korrekció

$$\mu_k(x) = \mu_k^c(x) + \mu_k^{nc}(x), \quad k \geq 1, \quad (6.14a)$$

$$\mu_k^c(x) = P_0(x) T_k(x), \quad T_k(x) = -T_k(1-x), \quad (6.14b)$$

$$\mu_k^{nc}(x) = P_0(x) S_k(x), \quad S_k(x) = S_k(1-x) \quad (6.14c)$$

felbontása egyértelmű. Vezessük be a

$$K_k(x) = -F_k(x)/P_0(x) \quad (6.15)$$

jelölést. Ekkor a (6.5) egyenletből (4.7) alkalmazásával a

$$\boxed{K_k(f_0(x)) = f'_0(x)T_k(x) - T_k(f_0(x)) - S_k(f_0(x))} \quad (6.16)$$

egyenlőséghez jutunk. A mérték k -adik korrekciója meghatározható tehát, ha a $K_k(f_0(x))$ függvényt (6.16) szerint felbontjuk. Ha a szétválasztás megtehető, akkor egyértelmű is egyben.

A perturbált valószínűség sűrűség korrekcióinak meghatározását visszavezettük bizonyos függvények meghatározott típusú *felbontására*. E felbontást néha nem könnyű elvégezni. Máskor viszont egyszerűen megtehető, ilyen esetet vizsgálunk az alábbiakban.

6.1.2. A perturbációs számítás alkalmazása polinom leképezésekre

Tekintsük az

$$f(\varepsilon, x) = 1 - (1-2x)^2 + \sum_{j=1}^n \alpha_j (1-2x)^{2j} \quad (6.17)$$

polinomot, s tegyük fel, a függvény csak kismértékben tér el az

$$f_0(x) = f_L(x) = 1 - (1-2x)^2 \quad (6.18)$$

logisztikus parabolától. Nem szükséges megadnunk, mit tekintünk ezúttal ε -nak. A korrekciók az α_j számok hatványait fogják tartalmazni, amelyeket kicsiknek teszünk fel. Olvasszuk be ε -t az $f_1(x)$ perturbáló tagba, vagy vegyük formálisan az $\varepsilon=1$ értéket. Legyen a leképezés csupán első rendben perturbált

$$f_1(x) = \sum_{j=1}^n \alpha_j (1-2x)^{2j}, \quad (6.19)$$

$$f_k(x) \equiv 0, \quad k \geq 2. \quad (6.20)$$

Megjegyezzük, hogy a (6.2) feltétel miatt

$$\sum_{j=1}^n \alpha_j = 0, \quad (6.21)$$

amivel ekvivalens az, hogy az $f_1(x)$ korrekció előáll az

$$f_1(x) = (1 - f_0(x))f_0(x) \cdot [f_0(x) \text{ polinomja}] \quad (6.22)$$

alakban.

A master egyenlet k -adik korrekciójában ekkor az

$$F_k(x) = - \sum_{j=1}^k \frac{1}{j!} P_{k-j}^{[j-1]}(x) f_1^j(f_0^{-1}(x)) \quad (6.23)$$

függvény jelenik meg (ld. az A. Függelékét). Itt a

$$P_m^{[l]}(x) = \frac{d^l}{dx^l} P_m(x) \quad (6.24)$$

jelölést használtuk. A (6.15) definíció szerint

$$K_k(x) = \sum_{j=1}^k \frac{\pi}{j!} P_{k-j}^{[j-1]}(x) \sqrt{(1-x)x} f_1^j(f_0^{-1}(x)), \quad (6.25)$$

ahol felhasználtuk a logisztikus leképezéshez tartozó (4.23) valószínűség sűrűség

$$P_0(x) = \frac{1}{\pi \sqrt{x(1-x)}} \quad (6.26)$$

alakját.

Teljes indukcióval belátható, hogy a $T_k(x)$ és az $S_k(x)$ függvények, amelyeknek segítségével (6.14) szerint a mérték és a valószínűség sűrűség k -adik korrekciója kiszámítható, *véges polinomok*. E függvényeket a (6.16) felbontás alapján határozhatjuk meg.

Tekintsük a $k=1$ esetet. (6.13) és (6.22) összevetéséből látszik, ekkor polinomon kell elvégezni az előírt felbontást. Ez megtehető, s a

$$T_1(x) = (1-2x) \sum_{i=1}^{\infty} \eta_i^{(1)} (1-x)^i x^i, \quad (6.27a)$$

$$S_1(x) = \sum_{i=1}^{\infty} \zeta_i^{(1)} (1-x)^i x^i \quad (6.27b)$$

függvényekhez jutunk. Az összegzés felső határaitra $\kappa_1 - 1 = \nu_1 = (n-2)/2$ adódik, ha n páros, és $\kappa_1 = \nu_1 = (n-1)/2$, ha n páratlan. A $\zeta_i^{(1)}$ és $\eta_i^{(1)}$ paraméterekkel az α_j számok kifejezhetők. Például az $n=8$ esetben, amikor a leképezés 16-od fokú polinom,

$$\left. \begin{aligned} \alpha_8 &= -\zeta_4^{(1)}; \\ \alpha_7 &= 2(\eta_3^{(1)} + \zeta_4^{(1)}), \\ \alpha_6 &= \zeta_3^{(1)} - 6\zeta_4^{(1)} - 7\eta_3^{(1)}, \\ \alpha_5 &= -3\zeta_3^{(1)} + 4\zeta_4^{(1)} - 2\eta_2^{(1)} + 9\eta_3^{(1)}, \\ \alpha_4 &= -\zeta_2^{(1)} + 3\zeta_3^{(1)} - \zeta_4^{(1)} + 5\eta_2^{(1)} - 81\eta_3^{(1)}/16, \\ \alpha_3 &= 2\zeta_2^{(1)} - \zeta_3^{(1)} + 2\eta_1^{(1)} - 15\eta_2^{(1)}/4 + 19\eta_3^{(1)}/16, \\ \alpha_2 &= \zeta_1^{(1)} - \zeta_2^{(1)} - 4\eta_1^{(1)} + \eta_2^{(1)}/2 - 3\eta_3^{(1)}/16, \\ \alpha_1 &= -\zeta_1^{(1)} + 2\eta_1^{(1)} + \eta_2^{(1)}/4 + \eta_3^{(1)}/16. \end{aligned} \right\} (6.28)$$

Az egyenletrendszerből meghatározhatjuk a $\zeta_i^{(1)}$, $\eta_i^{(1)}$ paraméterek aktuális értékét. Az invariáns mérték első korrekciója (6.14)-ből, a valószínűség sűrűség (6.3b)-ből számítható ki. A sűrűség függvény első rendben

$$P(\zeta_i^{(1)}, \eta_i^{(1)}; x) = \frac{1}{\pi \sqrt{x(1-x)}} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left[(1-2x) \sum_{i=1}^{\infty} \zeta_i^{(1)} x^{i-1} (1-x^{i-1}) + \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_{i=1}^{v_1} \eta_i^{(1)} x^{i-1} (1-x)^{i-1} (1-2i(1-2x)^2) \right] \right\} + O(\zeta_i^{(1)2}, \eta_i^{(1)2}). \quad (6.29)$$

Tegyük most fel, hogy az $l=2, 3, \dots, k-1$ indexű $T_l(x)$ és $S_l(x)$ függvények szintén polinomok. Ekkor könnyen belátható, hogy a (6.25) által megadott $K_k(x)$ is polinom. Ugyanis (6.14) és (6.3b) alapján

$$P_{k-1}^{[j-1]}(x) = [x(1-x)]^{\frac{j-1}{2}} \cdot \text{polinom}, \quad (6.30)$$

viszont (6.22) szerint a szinguláris tényező az

$$f_1^j(f_0^{-1}(x)) = [x(1-x)]^j \cdot \text{polinom} \quad (6.31)$$

függvénnyel való szorzáskor eltűnik. Végül (6.25) szerint

$$K_k(x) = x(1-x) \cdot \text{polinom} \quad (6.32)$$

adódik, amelyet (6.16) által előírt módon valóban felbonthatunk a $T_k(x)$ és $S_k(x)$ polinomok segítségével. A $K_k(x)$ (6.32) kifejezéséből látható, a

$$T_k(x) = (1-2x) \sum_{i=1}^{v_k} \eta_i^{(k)} x^i (1-x)^i, \quad (6.33a)$$

$$S_k(x) = \sum_{i=1}^{\infty} \zeta_i^{(k)} x^i (1-x)^i \quad (6.33b)$$

polinomokkal a felbontás elvégezhető. Következésképp — (6.14) figyelembevételével — teljesül a mérték korrekciójára előírt $\mu_k(0) = \mu_k(1) = 0$ határfeltétel is.

A fentiekben eljárást adtunk arra, véges fokszámú polinom leképezés esetén hogyan számíthatóak ki a valószínűség sűrűség *tetszőleges rendű* korrekciói. Példaként az

$$f_q(\varepsilon, x) = 1 - (1-\varepsilon)(1-2x)^2 - \varepsilon(1-2x)^4 \quad (6.34)$$

negyedfokú leképezésre írjuk fel a sűrűség függvényt:

$$P_q(\varepsilon, x) = \frac{1}{\pi \sqrt{x(1-x)}} \left\{ 1 - \frac{\varepsilon}{2} (1-2x) + \frac{3\varepsilon^2}{8} [1 + (1-2x) - 8x(1-x)] + \right. \\ \left. \frac{\varepsilon^3}{96} [-30 - 9(1-2x) + 124x(1-x) + 176(1-2x)x(1-x)] + O(\varepsilon^4) \right\}. \quad (6.35)$$

Általában azt mondhatjuk, a polinom leképezésekhez tartozó valószínűség sűrűség előáll a

$$P(\varepsilon, x) = \frac{1}{\pi \sqrt{x(1-x)}} \left[1 + \sum_{k=1}^{\infty} \varepsilon^k q_k(x) \right] \quad (6.36a)$$

alakban, ahol $q_k(x)$ véges polinom.

A $K_k(x)$ polinomok fokszáma a k index növelésével nő. Ezért azt gondoljuk a $q_k(x)$ polinomok $Z(k)$ fokszáma is egyre nagyobb lesz, párhuzamosan k növekedésével. Mivel a $q_k(x)$ polinomokat minden k -ra meg tudjuk határozni, azt mondhatjuk, a *perturbációs számítás segítségével megfelelően átrendezhettük a valószínűség sűrűség hatványsorát*.

A fentihez hasonló gondolatmenettel az olyan leképezések valószínűség sűrűségét is tetszőleges rendben meghatározhatjuk, amelyek az $|1-2x|$ polinomjai. Ilyenkor az $f_H(x)$ háztető leképezés körül fejtünk sorba, s a

$$P(\varepsilon, x) = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \varepsilon_k \tilde{q}_k(x) \quad (6.36b)$$

hatványsorhoz jutunk, ahol $\tilde{q}_k(x)$ $|1-2x|$ véges polinomja. Példaképp az

$$f_t(\varepsilon, x) = 1 - (1-\varepsilon)|1-2x| - \varepsilon(1-2x)^2 \quad (6.36c)$$

nem sima *másodfokú leképezéshez* tartozó valószínűség sűrűség függvényt adjuk meg másodrendig

$$P_t(\varepsilon, x) = 1 + \varepsilon(2x-1) + \frac{\varepsilon^2}{3}[-2+3(1-2x)+6(1-2x)^2] + O(\varepsilon^3). \quad (6.36d)$$

6.2. A Ljapunov-exponens és egy felső korlátja

Feltéve, hogy a valószínűség sűrűsége felírt perturbációs sor konvergens, s a sor tagjait ismerjük, e fejezetben a Ljapunov-exponens ε szerinti hatványsorát vizsgáljuk. A

$$\bar{\lambda}(\varepsilon) = \int_0^1 P(\varepsilon, x) \ln |\partial f(\varepsilon, x)/\partial x| dx \quad (6.37)$$

Ljapunov-exponenst sorbafejtve

$$\bar{\lambda}(\varepsilon) = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k \bar{\lambda}_k \quad (6.38a)$$

adódik, ahol

$$\bar{\lambda}_0 = \int_0^1 P_0(x) \ln |f'_0(x)| dx, \quad (6.38b)$$

$$\bar{\lambda}_1 = \int_0^1 P_1(x) \ln |f'_0(x)| dx + \int_0^1 P_0(x) \frac{f'_1(x)}{f'_0(x)} dx, \quad (6.38c)$$

$$\begin{aligned} \bar{\lambda}_2 = & \int_0^1 P_1(x) \frac{f'_1(x)}{f'_0(x)} dx + \int_0^1 P_0(x) \frac{f'_2(x)}{f'_0(x)} dx - \frac{1}{2} \int_0^1 P_0(x) [f'_1(x)/f'_0(x)]^2 dx + \\ & + \int_0^1 P_2(x) \ln |f'_0(x)| dx. \end{aligned} \quad (6.38d)$$

A magasabb indexű korrekciók általános kifejezését a B. Függelékben találja meg az olvasó.

A Ljapunov-exponens $\bar{\lambda}_1$ első korrekcióját additív módon felbonthatjuk konjugálással kapcsolatos és nem konjugálásból származó részekre

$$\bar{\lambda}_1 = \bar{\lambda}_1^c + \bar{\lambda}_1^{nc}. \quad (6.39a)$$

ahol

$$\bar{\lambda}_1^c = \int_0^1 P_1^c(x) \ln |f_0'(x)| dx + \int_0^1 P_0(x) \frac{f_1^{c'}(x)}{f_0'(x)} dx, \quad (6.39b)$$

és

$$\bar{\lambda}_1^{nc} = \int_0^1 P_1^{nc}(x) \ln |f_0'(x)| dx + \int_0^1 P_0(x) \frac{f_1^{nc'}(x)}{f_0'(x)} dx. \quad (6.39c)$$

Itt P_1^c és P_1^{nc} a (6.14) és (6.3b) képletekkel adott, míg f_1^c és f_1^{nc} (6.10)-ből határozható meg. Ekvivalens leképezésekhez azonos Ljapunov-exponens tartozik, ezért

$$\bar{\lambda}_1^c = 0, \quad (6.40)$$

s így

$$\bar{\lambda}_1 = \bar{\lambda}_1^{nc} = \int_0^1 [P_0(x) S_1(x)]' \frac{P_0(1-x) - P_0(x)}{P_0(1-x) + P_0(x)} dx. \quad (6.41)$$

Ha a nulladrendű leképezés *kettős szimmetriát* mutat, azaz f_0 mellett P_0 is szimmetrikus, akkor

$$\bar{\lambda}_1 = 0, \quad (6.42)$$

a Ljapunov-exponens első korrekciója eltűnik. Ez összhangban van számítógépes mérésekkel, amelyek szerint a logisztikus parabolához hasonló alakú leképezésekhez olyan Ljapunov-exponensek tartoznak, amelyek a $\bar{\lambda}_0 = \ln 2$ értéktől igen kis mértékben térnek el.

A magasabb rendű korrekciók tárgyalása az általános esetben igen bonyolult. Ezért ilyen korrekciót konkrét leképezések esetén számítottunk a későbbiek során.

Érdekes a perturbációs számítás módszerével a Ljapunov-exponens

$$L_f = -M_f \ln M_f - (1 - M_f) \ln (1 - M_f) \cong \bar{\lambda}_f \quad (6.43)$$

Chang—Wright-féle felső korlátját vizsgálni [64]. Itt

$$M_f = \int_0^{1/2} P_f(x) dx = \mu_f(1/2) \quad (6.44)$$

annak valószínűsége, hogy adott időpontban a trajektória a $(0, 1/2)$ intervallumba esik. Ha a P_f sűrűség függvény szimmetrikus, akkor $M_f = 1/2$; ennek megfordítottja nem mindig áll fenn.

Az L_f felső korlát gyakran igen jó becslést ad a Ljapunov-exponensre. A perturbációs számítás szempontjából fontos tulajdonsága, hogy ha a valószínűség sűrűség a k -adik rendig ismert, akkor L_f $O(\varepsilon^{k+1})$ pontossággal adható meg.

Ha például a perturbálatlan leképezés kettősen szimmetrikus, valamint az invariáns mérték $\mu_1(x)$ első korrekciója s így az $S_1(x)$ függvény ismert, akkor

$$L(\varepsilon) = \ln 2 - \varepsilon^2 2P_0^2(1/2)S_1^2(1/2) + O(\varepsilon^3). \quad (6.45)$$

Ily módon a master egyenlet első rendbeli megoldása a Ljapunov-exponens második korrekciójára szolgáltat felső korlátot

$$\lambda_2 < -2P_0^2(1/2)S_1^2(1/2). \quad (6.46)$$

A negatív felső korlát összhangban van azzal a tétellel, mely szerint a Ljapunov-exponens nem lehet nagyobb a topologikus entrópiánál (ld. pl. [33]). A topologikus entrópia ugyanis az $\ln 2$ értéket veszi fel a teljesen kifejlődött káosz esetén.

Az előző fejezet eredményei alapján *polinom leképezésekre* megadjuk a Chang—Wright-féle felső korlátot másodrendben

$$L(\zeta_i^{(1)}, \eta_i^{(1)}) \approx \ln 2 - \frac{8}{\pi^2} \left[\sum_{i=1}^{\infty} \zeta_i^{(1)} 4^{-i} \right]^2 + \dots \quad (6.47)$$

Az $f_q(\varepsilon, x)$ kvartikus leképezéshez, amelyet a (6.34) kifejezéssel definiáltunk, az

$$L(\varepsilon) = \ln 2 - \frac{\varepsilon^2}{2\pi^2} + \frac{3\varepsilon^3}{4\pi^2} - \frac{\varepsilon^4}{2\pi^2} \left[\frac{9}{16} + \frac{1}{3\pi^2} \right] + O(\varepsilon^5) \quad (6.48)$$

felső korláttal becsülhető Ljapunov-exponens tartozik. Magát a Ljapunov-exponenst is megadjuk az első nem eltűnő korrekció erejéig

$$\bar{\lambda}(\varepsilon) = \ln 2 - \frac{\varepsilon^2}{16} + O(\varepsilon^3). \quad (6.49)$$

Látható,

$$L(\varepsilon) \equiv \bar{\lambda}(\varepsilon) \quad (6.50)$$

valóban teljesül, $O(\varepsilon^2)$ rendig.

6.3. A korrelációs függvény

A valószínűség sűrűség korrekcióira vonatkozó eredményeink lehetővé teszik a $C(\varepsilon, \tau)$ korrelációs függvény számítását.

A korrelációs függvény

$$C(\varepsilon, \tau) = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k C_k(\tau) \quad (6.51)$$

hatványsora együtthatóinak általános kifejezése igen bonyolult. Általánosan csak az *elsőrendű* korrekciót vizsgáljuk.

A (4.13) definíció alapján

$$\begin{aligned} C(\varepsilon, \tau) = & \int_0^1 \left(x - \frac{1}{2} \right) (f^{(\tau)}(\varepsilon, x) - \bar{x}) P_0(x) dx + \\ & + \varepsilon \left\{ - \int_0^1 x P_1(x) dx \int_0^1 \left(x - \frac{1}{2} \right) P_0(x) dx + \right. \\ & \left. + \int_0^1 \left(x - \frac{1}{2} \right) \left(f_0^{(\tau)}(x) - \frac{1}{2} \right) P_1(x) dx \right\} + O(\varepsilon^2), \end{aligned} \quad (6.52)$$

ahol a (6.3a) sorfejtést használva írtuk fel a $P(\varepsilon, x)$ valószínűség sűrűséget és az $\bar{x}(\varepsilon)$ középértéket első rendben. Az első korrekció általános alakját a C. Függelékben adjuk meg.

Ezúttal azt az esetet vizsgáljuk, amikor a perturbálatlan leképezés kettős szimmetriájú, azaz f_0 mellett P_0 is szimmetrikus függvény. Ekkor (6.52) első tagja $\tau \equiv 1$ mellett eltűnik, a második tag második tényezője pedig zérus. A (6.14) és (6.3b) képletek alapján $P_1(x)$ -et felbonthatjuk két tag összegére. A konjugálással kapcsolatos $P_1^c(x)$ szimmetrikus, míg a nem konjugálásból származó $P_1^{nc}(x)$ az $(1/2, 0)$ pontra ferdén szimmetrikus függvény. Ennek alapján adódik a

$$C_0(\tau) = \delta_{\tau 0} \int_0^1 \left(x - \frac{1}{2}\right)^2 P_0(x) dx \quad (6.53)$$

perturbálatlan korreláció, valamint a

$$C_1(\tau) = C_1^c(\tau) + C_1^{nc}(\tau), \quad (6.54a)$$

$$C_1^c(\tau) = \delta_{\tau 0} \int_0^1 \left(x - \frac{1}{2}\right)^2 P_1^c(x) dx, \quad (6.54b)$$

$$C_1^{nc}(\tau) = \int_0^1 \left(x - \frac{1}{2}\right) \left(f_0^{(\tau)}(x) - \frac{1}{2}\right) P_1^{nc}(x) dx \quad (6.54c)$$

korrekció.

Azt, hogy $C_1^c(\tau) \propto \delta_{\tau 0}$ elvártuk, hiszen a szóban forgó konjugálás során a kettős szimmetria tulajdonsága megmarad. Azt azonban nem láthattuk előre, hogy a nem konjugálásból származó rész első rendben nem változtatja meg a $\tau=0$ csúcs amplitúdóját.

Példaként megadjuk a 6.1.2. fejezetben vizsgált 16-od fokú *polinom leképezés*-hez tartozó korrelációs függvényt. A perturbálatlan korreláció (4.25b) szerint

$$C_0(\tau) = \frac{1}{8} \delta_{\tau 0}. \quad (6.55)$$

Az ε paramétert a polinom leképezés (6.19) korrekciójába beolvasztottuk. Ez az $\varepsilon=1$ formális beállításnak felel meg. A (6.28)-ban bevezetett paramétereket felhasználva kapjuk

$$C_1^c(\tau) = \delta_{\tau 0} (2^{-5} \eta_1^{(1)} + 2^{-8} \eta_2^{(1)} + 5 \cdot 2^{-13} \eta_3^{(1)}) \quad (6.56a)$$

$$C_1^{nc}(\tau) = \delta_{\tau 1} (2^{-5} \zeta_1^{(1)} - 5 \cdot 2^{-13} \cdot \zeta_3^{(1)} - 7 \cdot 2^{-15} \zeta_4^{(1)}) - \\ - \delta_{\tau 2} (3 \cdot 2^{-9} \cdot \zeta_2^{(1)} + 5 \cdot 2^{-12} \cdot \zeta_3^{(1)} + 7 \cdot \zeta_4^{(1)}) - \delta_{\tau 3} \cdot 7 \cdot 2^{-17} \cdot \zeta_4^{(1)}. \quad (6.56b)$$

Az $f_q(\varepsilon, x)$ *negyedfokú leképezésre* másodrendben is végeztünk számításokat. A leképezést (6.34) definiálja, ekkor $\zeta_1^{(1)} = -\varepsilon$ és $\eta_i^{(1)} = 0$, $\zeta_j^{(1)} = 0$, $j \geq 2$. A korrelációs függvény

$$C(\varepsilon, \tau) = \left(\frac{1}{8} + 2^{-7} \varepsilon^2\right) \delta_{\tau 0} + (-2^{-5} \cdot \varepsilon + 3 \cdot 2^{-7} \cdot \varepsilon^2) \delta_{\tau 1} + 2^{-6} \cdot \varepsilon^2 \cdot \delta_{\tau 2} + O(\varepsilon^3). \quad (6.57)$$

A frekvencia spektrum a (4.13c) definícióból adódik. Példaként a negyedfokú leképezés frekvencia spektrumát adjuk meg

$$\hat{C}(\varepsilon, \omega) = \frac{1}{8} + 2^{-7} \cdot \varepsilon^2 + \left(-\frac{\varepsilon}{16} + 3 \cdot 2^{-6} \cdot \varepsilon^2 \right) \cos \omega + 2^{-5} \cdot \varepsilon^2 \cos 2\omega + O(\varepsilon^3). \quad (6.58)$$

A kaotikus trajektóriákhoz tartozó zajspektrum általában *nem fehér*. A $P(\varepsilon, x)$ valószínűség sűrűség (6.36a) szerkezete alapján arra számítunk, hogy annál nagyobb frekvenciájú komponensek lépnek fel, minél magasabb rendben végezzük a számításokat.

* * *

A 6.2. és 6.3. fejezetekben láttuk, nem szimmetrikus valószínűség sűrűséggel leírható trajektóriákhoz $\tilde{\lambda}_f < \ln 2$ Ljapunov-exponens és $C_f(\tau) \neq \text{const } \delta_{\tau 0}$ korrelációs függvény tartozik. Azt mondhatjuk ezért, ha eltérünk a kettős szimmetriát mutató leképezésektől, akkor a *kaotikusság foka csökken*, az iteráció *memóriára tesz szert*.

7. EGY NUMERIKUS MÓDSZER: A MASTER EGYENLET ITERÁCIÓJA

E fejezetben olyan numerikus módszert javasolunk, amelynek segítségével a trajektóriákat jellemző valószínűségi eloszlást közelíthetjük.

Többféle módszer ismeretes a valószínűség sűrűség megközelítésére. Hisztogramot vehetünk fel közvetlen iterációval (ld. pl. [41]), sima leképezést interpolálhatunk szakaszonként lineáris függvénnyel [11, 73], vagy például használhatjuk a Fourier-sorfejtés módszerét [64, 74]. Ezúttal a (4.11b) master egyenletet *függvényiteráció* útján kívánjuk numerikusan megoldani. Az iteráció konvergenciájáról ld. a [42] hivatkozást.

A master egyenletet a

$$\mu_f^{(0)}(x) \equiv x \quad (7.1)$$

függvényből indulva a

$$\mu_f^{(n)}(x) = 1 + \mu_f^{(n-1)}(f_i^{-1}(x)) - \mu_f^{(n-1)}(f_u^{-1}(x)) \quad (7.2)$$

szabály szerint iteráljuk. Hasonló módon vezethetjük be a master egyenlet (6.5) korrekciójának megoldási módszerét

$$\mu_k^{(n)}(x) = F_k(x) + \mu_k^{(n-1)}(f_{0l}^{-1}(x)) - \mu_k^{(n-1)}(f_{0u}^{-1}(x)). \quad (7.3)$$

Az utóbbi esetben választhatjuk a

$$\mu_k^{(0)}(x) = F_k(x) \quad (7.4)$$

függvényt kiindulásul.

Az iteráció általában néhány lépés alatt olyan zárt alakban megadható függvényekhez vezet, amelyek aszimptotikus viselkedését jellemző exponensek összhangban vannak a 4.4. fejezet eredményeivel. A megfelelő amplitúdók pedig gyors konvergenciát mutatnak.

Várakozásunk szerint a master egyenlet korrekcióinak (7.3) iterációja során polinom leképezések esetén *véges számú* lépés alatt eljuthatunk az egzakt $\mu_k(x)$ függvényhez. Ezt az alacsony rendben végzett számítások is alátámasztják. Ily módon igen egyszerű számítógépes eljárást használva megkerülhetjük azt, hogy a (6.16) felbontást közvetlenül el kelljen végeznünk. *Numerikus* célokra bevezetett módszerünk tehát *analitikus* formulák levezetéséhez is segítséget nyújt.

8. ELMÉLETI ÉS SZÁMÍTÓGÉPPEL NYERT EREDMÉNYEK ÖSSZEHASONLÍTÁSA

Először az előző fejezetben bevezetett *függvényiterációs eljárás* alkalmazásával foglalkozunk. A leképezések két családjánál vizsgáljuk az

$$M_f = \int_0^{1/2} P_f(x) dx = \mu_f(1/2) \quad (8.1)$$

mennyiséget, amely a valószínűség sűrűség szimmetriájáról adhat számot.

Tekintsük először az $f_q(\varepsilon, x)$ kvartikus leképezést, melyet (6.34) definiál. A valószínűség sűrűség (6.35) kifejezése alapján perturbatív úton kapjuk

$$M_q(\varepsilon) = \frac{1}{2} - \frac{\varepsilon}{2\pi} + \frac{3\varepsilon^2}{8\pi} - \frac{\varepsilon^3}{12\pi} + O(\varepsilon^4). \quad (8.2)$$

A 8.1. ábrán látható a fenti görbe és összehasonlításként a (7.2) iterációval nyert, egzaktak tekinthető $M_q(\varepsilon)$ függvény.

Tanulmányoztuk az

$$\begin{aligned} f_s(\varepsilon, x) &\equiv 1 - |1 - 2x|^{2(1-\varepsilon)} = \\ &= 1 - (1 - 2x)^2 \left\{ 1 + \varepsilon \ln(1 - 2x) + \frac{\varepsilon^2}{2} [\ln(1 - 2x)]^2 + \dots \right\} \end{aligned} \quad (8.3)$$

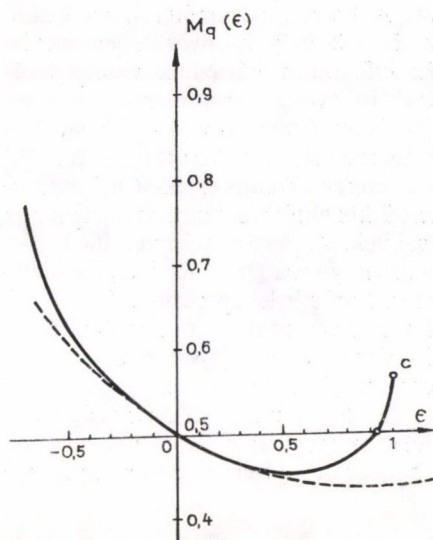
leképezéseket is. Mivel a hatványsor az $x=1/2$ helyen nem konvergens, kérdéses, vajon sorbafejthető-e a $\mu_s(\varepsilon, x)$ mérték minden x helyen az ε hatványai szerint. A master egyenlet első korrekciójában (ld. (6.5) $k=1$ mellett) az

$$F_1(x) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{1-x}{x}} \ln(1-x) \quad (8.4)$$

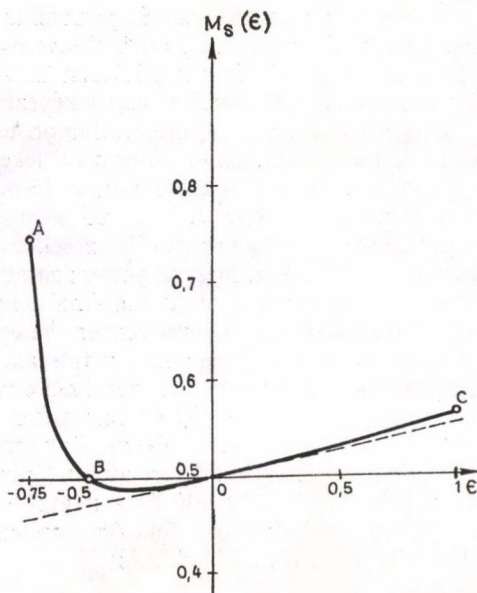
függvény lép fel. Ha az egyenletet az $x \rightarrow 0$ és $x \rightarrow 1$ aszimptotikus tartományban vizsgáljuk, azt tapasztaljuk, hogy a $\mu_1(x)$ korrekcióban logaritmikusan szinguláris függvények jelennek meg. Azonban a teljes, első rendig felírt

$$\mu_s(\varepsilon, x) \approx \mu_0(x) + \varepsilon \mu_1(x) \quad (8.5)$$

invariáns mértékben a logaritmikusan járulékoktól újra-exponencializálás útján megszabadulhatunk. Magasabb rendű korrekciók esetén is azt várjuk ezért, abban a tartományban, ahol $\mu_s(\varepsilon, x)$ sora a logaritmikusan szinguláris tagok miatt nem konvergens, a probléma exponencializálással megoldható. Természetesen az expo-



8.1. ábra. A kvartikus leképezéshez tartozó $M_q(\epsilon)$ függvény. Az egzakt görbét folytonos, a perturbációs számításból adódót szaggatott vonallal jelöltük. A C pont az $f_q(1, x) = 1 - (1 - 2x)^4$ leképezést reprezentálja



8.2. ábra. Az $f_s(\epsilon, x)$ leképezéshez tartozó $M_s(\epsilon)$ függvény. Az egzakt értékeket folytonos vonal, a lineáris közelítést szaggatott egyenes jelöli. Az A pont a 9.2.2. fejezetben egzaktul tárgyalt $f_s(-3/4, x) = 1 - \sqrt[4]{1-2x}$ leképezésnek, a B pont az f_H háztető függvénynek, míg C az $f_s(1, x) = 1 - (1 - 2x)^4$ kvartikus leképezésnek felel meg (ld. a 8.1. ábrát)

nencializálás műveletéhez csak ϵ -ban a vizsgálnál magasabb rendű függvényeket használhatunk fel.

Az $f_s(\epsilon, x)$ leképezéshez tartozó $M_s(\epsilon)$ függvényt csupán első rendig számítjuk ki. A master egyenlet első korrekcióját (7.3) szerint iteráljuk az $x = 1/2$ helyen. Így nyerjük a

$$\mu_1(1/2) = 0,0542 \dots, \quad (8.6)$$

számot, ahol felhasználtuk a (8.4) kifejezést. Innen (8.1) felhasználásával

$$M_s(\epsilon) = \frac{1}{2} + \epsilon \cdot 0,0542 \dots + O(\epsilon)^2 \quad (8.7)$$

adódik. A megfelelő egyenest a 8.2. ábrára rajzoltuk, ahol a (7.2) iterációval kapott egzakt $M_s(\epsilon)$ görbét is feltüntettük.

A fejezet hátralevő részében a Ljapunov-exponenst, Chang—Wright-féle felső korlátját és a korrelációs függvényt vizsgáljuk. Az elsősorban az irodalomból származó számítógépes mérési adatokat összevetjük a perturbációs számítás eredményeivel.

Miként arról a 3.2. fejezetben szó esett, bizonyos r kontrollparaméter értékek mellett az $f_L(r, x)$ logisztikus leképezés olyan trajektóriákat generál, amelyek mozgá-

sát teljesen kifejlődött káosz és periodikus oszcilláció szuperpozíciójának tekinthetjük. A megfelelő periódus $p=2^k$, illetve $p=1$, ha a kontrollparaméter értéke $r=q_k$, illetve $r=\tilde{q}_1$ a 3.2. fejezet jelöléseit használva. A kontrollparaméter ilyen beállítása mellett az $f_L^{(p)}$ p -edik iterált leképezést az $\hat{x}=1/2$ hely környezetében megfelelően kinagyítva, a $[0, 1]$ intervallumon teljesen kifejlődött káoszhoz vezető leképezéshez jutunk (ld. az 4.1. ábrát). E leképezések függvényei szimmetrikus polinomok. A 6.2. és 6.3. fejezetekben a 16-od fokú és az $f_q(\varepsilon, x)$ kvartikus leképezés sztochasztikus viselkedését jellemző mennyiségeket számítottuk perturbatív úton. Az alkalmazások során a kapott kifejezésekbe a paraméterek aktuális értékeit helyettesítjük be. Előfordulhat, hogy egyes magasabb rendű közelítésből származó járulékok bizonyos alacsonyabb rendű tagoknál lényegesebbek. A perturbációs számítást csak akkor alkalmazhatjuk konzekvensen, ha egy mennyiség sorában fellépő tagok nagyságrendjét részletes vizsgálatnak vetjük alá minden konkrét leképezésnél. Az alábbiakban tárgyalt polinom leképezéseknél e vizsgálatot elvégeztük. Általában azt találtuk, hogy a $\zeta_1^{(1)}$, $\eta_1^{(1)}$ és $[\zeta_1^{(1)}]^2$ paraméterekkel arányos tagokból származik a korrekciók vezető járuléka. Emlékeztetünk arra, hogy az $f_q(\varepsilon, x)$ leképezésbeli ε megfelel a $-\zeta_1^{(1)}$ paraméternek. Ezért az általános polinom leképezések valószínűség sűrűségére vonatkozó elsőrendű és a negyedfokú leképezéssel kapcsolatos másodrendű számításainkat használjuk fel. Az elméleti és numerikus kísérleti eredményeket a 8.1. táblázatban tüntetjük fel. Az

$$\varepsilon = -\zeta_1^{(1)} \quad (8.8)$$

szám a polinom leképezések kezdeti deriváltját jellemzi:

$$f'(0) = 4(1 + \varepsilon). \quad (8.9)$$

Azt mondhatjuk, ε méri a kettősen szimmetrikus, kvadratikus maximumú leképezések

$$f'(0) = 4 \quad (8.10)$$

kezdeti meredekségétől való eltérést (ld. (4.50)). A táblázatban megadjuk az r kontrollparaméter értékét, az iterált leképezés polinomja p fokszámát, a megfelelő ε számot, a korrelációs függvényt a $\tau=0$, $\tau=1$ és $\tau=2$ argumentumoknál, valamint a Ljapunov-exponenst és Chang—Wright-féle felső korlátját. Először a kísérleti adatot tüntetjük fel, utalva a forrás hivatkozási számára, majd az alatt a perturbációs számításból származó eredményt írjuk fel. Az elméleti eredmény mellett zárójelbe tett ε^a szám azt jelzi, ε -ban milyen rendű korrekciókat hagytunk figyelmen kívül.

A számítógépes és perturbatív úton kapott eredmények összehasonlításából arra következtethetünk, jól választottuk meg az ε paramétert. A kísérleti és az elméleti eredmények közötti eltérés aránya ugyanis láthatóan megfelel az

$$\varepsilon^a/\varepsilon^b \quad (8.11)$$

hányadosnak, ahol b az első el nem tűnő, a pedig az első figyelmen kívül hagyott korrekció rendszáma.

A 8.1. táblázatban feltüntetjük a Ljapunov-exponens aszimptotikus kifejezésében fellépő *univerzális amplitúdóra* vonatkozó közelítésünket. A A amplitúdó a teljesen kifejlődött káosz univerzális függvényéhez (ld. 3.2. fejezet) tartozó Ljapunov-

8.1. TÁBLÁZAT

A logisztikus leképezésnél kis hosszskálán fellépő teljesen kifejlődött káosz sztochasztikus tulajdonságai. Elméleti és számítógépes kísérleti eredmények összehasonlítása. A táblázat részletes magyarázatára a szövegben kerül sor

r	p	ε	$C(0) - \frac{1}{8}$	$C(1)$	$C(2)$	$\frac{L}{\ln 2}$	$\frac{\bar{\lambda}}{\ln 2}$
$q_1 =$ $= 3,6785 \dots$	4	$-0,296 \dots$	$\sim 10^{-3}$ [71]	$\gtrsim 0,01$ [71]	$\sim 10^{-3}$ [71]	$1 - 0,009$ [72]	$1 - 0,013$ [47]
			0,001 (ε^3)	0,011 (ε^3)	0,001 (ε^3)	$1 - 0,009$ (ε^5)	$1 - 0,008$ (ε^3)
$q_2 =$ $= 3,5925 \dots$	16	$-0,256 \dots$	$\sim 10^{-3}$ [71]	$\sim 0,01$ [71]	$\sim 10^{-3}$ [71]	—	—
			0,001 (ε^3)	0,010 (ε^3)	0,001 (ε^3)	$1 - 0,0068$ (ε^4)	$1 - 0,0060$ (ε^3)
$\tilde{q}_3 =$ $= 3,8568 \dots$	8	$-0,071 \dots$	—	—	—	—	$1 - 4 \cdot 10^{-4}$ [56]
			$2 \cdot 10^{-5}$ (ε^3)	0,0023 (ε^3)	0,0001 (ε^3)	$1 - 4,1 \cdot 10^{-4}$ (ε^4)	$1 - 4,6 \cdot 10^{-4}$ (ε^3)
$r_\infty =$ $= 3,5699 \dots$	∞	$-0,263 \dots$	—	—	—	$1 - 0,009$ [64]	$1 - 0,009$ [64]
			—	—	—	$1 - 0,0067$ (ε^4)	$1 - 0,0066$ (ε^3)

-exponens. A $\gamma_0(x)$ univerzális függvény az $(1-2x)^2$ hatványainak végtelen sora, alacsony rendű közelítésekhez azonban alacsony fokszámú polinommal helyettesíthetjük.

Megjegyezzük, a megfelelő $\varepsilon = \varepsilon_\infty$ szám kapcsolatos a γ univerzális exponenssel, $\gamma = 4(1 + \varepsilon_\infty)$. A γ szám az $\underbrace{RLL \dots L}_{m} * R^{*n}$ szekvenciákat jellemző q_m^n kontroll-

paraméter értékek $q_m^n - q_\infty^n \propto (\gamma_n)^{-m}$ skálaviselkedését írja le aszimptotikusan, $\lim_{n \rightarrow \infty} \gamma_n = \gamma$ [71, 75, 76].

A perturbációszámítást a teljesen kifejlődött káosz statisztikai leírása céljából vezettük be. Kézenfekvőnek látszik ezért az a várakozás, mely szerint eljárásunkat a kaotikus átalakulási ponttól távoli tartományban használhatjuk. A renormálási transzformáció segítségével azonban a dinamikai rendszer az átalakulás közelében is alkalmassá tehető arra, hogy sztochasztikus tulajdonságait perturbatív módszerekkel vizsgáljuk. Példát erre a A univerzális amplitúdó perturbatív közelítésével mutattunk.

9. EGZAKT MEGOLDÁSOK

9.1. A master egyenlet általános vizsgálata

Az eddigiekben perturbációs módszert mutattunk olyan invariáns mérték függvények közelítő meghatározására, amelyek egydimenziós, szimmetrikus leképezések által generált trajektóriák sztochasztikus viselkedését írják le. Ezúttal olyan szimmetrikus leképezéseket vizsgálunk, amelyekhez tartozó invariáns mérték függvények zárt alakban megadhatóak. Példáink a perturbációs számítás szempontjából is jelentőséggel bírnak, hisz ezen eljárás lényege egzaktul ismert invariáns mérték függvények körüli sorfejtés.

Mint arról korábban már szó esett, ha a szimmetrikus leképezést az $(1/2, 1/2)$ pontra nézve ferdén szimmetrikus folytonos transzformáció, konjugálás köti össze a háztető leképezéssel, akkor az invariáns mérték éppen a transzformáció függvénye, s így ferdén szimmetrikus. Az általános esetben az invariáns mérték függvény felbontható egy ferdén szimmetrikus és egy szimmetrikus résznek az összegére. Azt mondhatjuk, az előbbi a háztető leképezéshez való konjugálásból származik, míg az utóbbit más eredetűnek tekinthetjük. A perturbációs módszer tárgyalásánál láttuk, hogy az első rendben nemcsak az invariáns mérték, hanem a leképezés is előáll konjugálással nyert és egy a konjugálásból le nem származtatható függvény összegeként. Az alábbi egzakt vizsgálatok azonban azt mutatják, a leképezésekben általában nem additív módon lépnek föl a konjugálással kapcsolatos, illetve az egyéb részek. Megjegyezzük azonban, ha az invariáns mérték egyértelműen meghatározott, akkor a megfelelő leképezés függvényalakjában egyértelmű módon jelenik meg az a járulék, amely a háztető leképezéssel való ekvivalencia esetleges „elrontásáért” felelős.

Tekintsük a teljesen kifejlődött káoszhoz vezető $f(x)$ leképezést, s a hozzá tartozó $\mu_f(x)$ invariáns mértéket. Bontsuk fel a mértéket ferdén szimmetrikus és szimmetrikus részre

$$\mu_f(x) = T(x) + S(x), \quad (9.1a)$$

ahol

$$T(x) = 1 - T(1-x), \quad T(0) = 0; \quad (9.1b)$$

$$S(x) = S(1-x), \quad S(0) = 0. \quad (9.1c)$$

Szimmetrikus f esetén a master egyenlet

$$\mu_f(x) = 1 + \mu_f(f_i^{-1}(x)) - \mu_f(f_u^{-1}(x)), \quad (9.2)$$

amelyben f_i^{-1} és $f_u^{-1} = 1 - f_i^{-1}$ a leképezés inverzének alsó, ill. felső ágát jelöli. A (9.1) felbontást használva kapjuk

$$T(x) + S(x) = 1 + S(f_i^{-1}(x)) + T(f_i^{-1}(x)) - S(f_u^{-1}(x)) - T(f_u^{-1}(x)) = 2T(f_i^{-1}(x)). \quad (9.3)$$

Innen a leképezés inverze kifejezhető

$$f_i^{-1}(x) = T^{-1} \left[\frac{1}{2} (T(x) + S(x)) \right]. \quad (9.4)$$

Amennyiben $S(x) \equiv 0$, akkor (9.4) alapján

$$f(x) = T^{-1}(2T(x)), \quad x \leq 1/2, \quad (9.5)$$

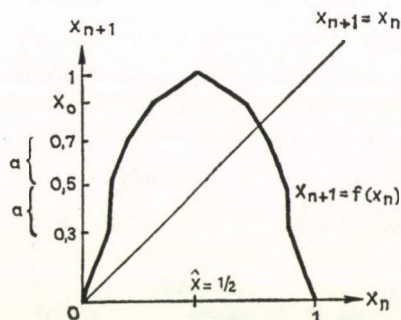
azaz f metrikusan ekvivalens a háztető leképezéssel.

A leképezések széles osztályához tartozik $S(x) \not\equiv 0$ függvény. A (9.4) egyenletet felhasználva általában a szimmetrikus leképezés inverzét adhatjuk csak meg. Néhány esetben azonban magát a leképezést is felírhatjuk zárt alakban, a legrészletesebben ilyen iterációkat fogunk tanulmányozni.

9.2. Példák egzaktul megoldható problémákra

9.2.1. Egy szakaszonként lineáris leképezés

Vizsgáljuk először az olyan szimmetrikus, szakaszonként lineáris leképezéseket, amelyek legfeljebb kilenc helyen nem deriválhatóak. A függvény törjön az $(1/2, 1)$ pontban, tartozzon két törésponthoz az $1/2$ képpont, tőle azonos távolságban legyen további négy töréspont a és $1-a$ értékekkel ($a < 1/2$), s ezeken kívül legfeljebb két töréspontot engedünk meg az x_0 függvényértéknél (ld. 9.1. ábra).



9.1. ábra. Kilenc törésponttal rendelkező, szakaszonként lineáris leképezés

Vezessük be a b és c paramétereket a következő formulákkal

$$b = \frac{af'(0)}{2af'(0) - f'(1/2-0)(f'(0) - 1)(2a - 1)}, \quad (9.6a)$$

$$c = \frac{2 - f'(0)}{4af'(0) - 2f'(1/2-0)(f'(0) - 1)(2a - 1)}. \quad (9.6b)$$

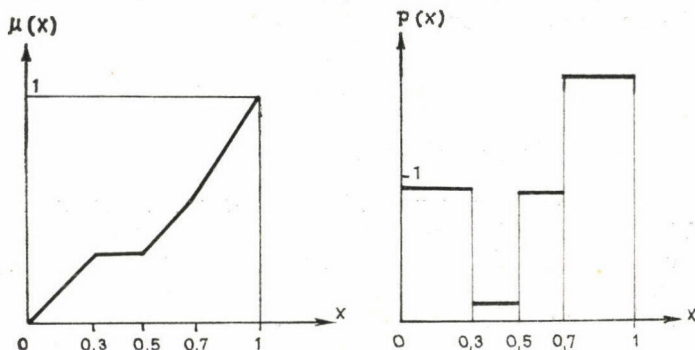
Az invariáns mérték (9.4) alapján (9.1) alakú, ahol

$$T(x) = \begin{cases} bx/a, & 0 \leq x \leq a \\ \frac{1-2b}{1-2a}(x-1/2) + 1/2, & a \leq x \leq 1-a \\ 1-b/a + bx/a, & 1-a \leq x \leq 1 \end{cases}, \quad (9.7a)$$

$$S(x) = c(1 - |2x - 1|), \quad (9.7b)$$

amennyiben az a , b , c és x_0 számok között a D. Függelékben felsorolt összefüggések teljesülnek. A 9.1. ábrán látható leképezéshez tartozó invariáns mértéket és a valószínűség sűrűség függvényt a 9.2a—b ábrákkal szemléltetjük.

Példánk a D. Függelék követelményei miatt különlegesnek tekinthető. Kilenc helyen megtörő, szakaszonként lineáris leképezések ugyanis általában négynél több „lépcsőt” tartalmazó valószínűség sűrűséggel jellemezhetők.



9.2a—b. ábra. A 9.1. ábrán feltüntetett leképezéshez tartozó $\mu_f(x)$ invariáns mérték és $P_f(x)$ valószínűség sűrűség (a paraméterek értéke: $a=0,3$; $b=0,4$; $c=-0,2$)

9.2.2. Az egyenletestől ferdén szimmetrikusan eltérő valószínűség sűrűség esete

Az alábbiakban megvizsgáljuk az olyan leképezéseket, amelyeknek megfelelő invariáns mérték ferdén szimmetrikus összetevője a Lebesgue-mérték

$$T(x) \equiv x. \quad (9.8)$$

Ilyenkor (9.4) szerint

$$f^{-1}(x) = \frac{1}{2}[x + S(x)], \quad S(x) \equiv S(1-x). \quad (9.9)$$

Az invariáns mérték (9.1) alapján

$$\mu_f(x) = x + S(x) \quad (9.10)$$

amely azonos a (4.43) eredményünkkel.

Megjegyezzük, hogy (9.9)—(9.10) a perturbációs számítással összhangban van. A háztető leképezés körüli kis perturbációkat vizsgálva azt kaptuk, hogy az

$$f(\varepsilon, x) = f_0(x) - \varepsilon S_1(f_0(x)) + O(\varepsilon^2) \quad (9.11)$$

leképezéshez a

$$\mu(\varepsilon, x) = x + \varepsilon S_1(x) + O(\varepsilon^2) \quad (9.12)$$

invariáns mérték tartozik, ahol $f_0(x) = f_H(x)$ a (9.10) képlettel definiált háztető leképezés és $S_1(x)$ szimmetrikus. A perturbált $f(\varepsilon, x)$ függvény inverze első rendben

$$f^{-1}(\varepsilon, x) = \frac{1}{2}(x + \varepsilon S_1(x)) + O(\varepsilon^2). \quad (9.13)$$

Ezt a (9.9)–(9.10) kifejezésekkel összevetve, az $S(x) = \varepsilon S_1(x)$ megfeleltetéssel éppen a perturbációszámításból származó (9.12) közelítő invariáns mértéket kapjuk.

A fenti típusú leképezések valószínűség sűrűsége az egyenletes eloszlástól egy ferdén szimmetrikus tagban tér el. Az invariáns mérték (9.10) kifejezése alapján

$$P_f(x) = 1 + S'(x), \quad (9.14)$$

azaz (9.9) a leképezéseknek éppen az a családja, amelyre

$$P_f(x) + P_f(1-x) = \text{konst.} = 2. \quad (9.15)$$

Megjegyezzük, ha $\mu_f(x)$ nem deriválható valamely pontban, viszont itt léteznek jobb és bal oldali deriváltjai, a valószínűség sűrűség függvényt e helyen

$$P_f(x_0) = \frac{1}{2} [S'(x_0-0) + S'(x_0+0)] + 1$$

értelmezi. A valószínűség sűrűség kielégíti a (4.7) egyenletet, amelyet (9.15)-tel összevetve

$$|f'(x)| = \frac{2}{P_f(f(x))} \quad (9.16)$$

adódik.

Az előzőek alapján a Ljapunov-exponens kifejezését célszerű formába írhatjuk át. A (4.12) definícióból kiindulva, (9.16)-ot és a valószínűség sűrűség stacionárius voltát felhasználva a

$$\bar{\lambda} = \ln 2 - \int_0^1 P_f(x) \ln P_f(x) dx \quad (9.17)$$

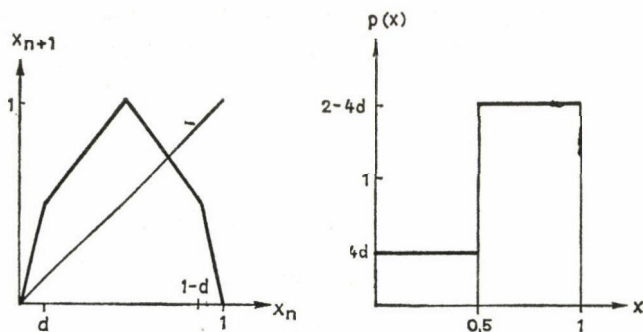
formulához jutunk. Megjegyezzük, ha az x véletlen változót egyre pontosabban mérjük, akkor a Shannon-entrópia változása a mérésakor a végtelenhez tart. A (9.17)-ben fellépő integrál a Shannon-entrópia nem szinguláris része.

A (9.9) leképezésre példa a 9.1. ábrán látható szakaszonként lineáris függvény egy speciális esete. Az $S(x)$ függvényt ekkor (9.7b) definiálja. A lineáris (9.9) kifejezést invertálva kapjuk

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1-|2x-1|}{1+2c}, & \left| \frac{1}{2} - x \right| \leq \frac{1-2c}{4} \\ 1 - \frac{|2x-1|}{1-2c}, & \left| \frac{1}{2} - x \right| \geq \frac{1-2c}{4} \end{cases}. \quad (9.18)$$

A megfelelő invariáns mérték (9.7b) és (9.8) felhasználásával (9.1)-ből adódik. A valószínűség sűrűség ennek alapján

$$P_f(x) = \begin{cases} 1+2c, & x < 1/2 \\ 1, & x = 1/2 \\ 1-2c, & x > 1/2 \end{cases}. \quad (9.19)$$



9.3a—b. ábra. A (9.18) leképezés és a megfelelő valószínűség sűrűség függvény; $c = 2d - 1/2$.

A kaotikusság fokát méri a Ljapunov-exponens, amelyet (9.17) és (9.19) felhasználásával határozhatunk meg. Az így nyert kifejezés éppen egyenlő a (6.43)-ban definiált Chang—Wright-féle L_f felső korlással

$$\bar{\lambda}_f = -M_f \ln M_f - (1 - M_f) \ln (1 - M_f) = L_f, \quad (9.20)$$

ahol

$$M_f = \int_0^{1/2} P_f(x) dx = 1/2 + c = 2d, \quad (9.21)$$

d jelentését a 9.3a ábrából olvashatjuk le.

A (9.18) függvény tehát nem triviális példa az olyan leképezésre, amelynél — az additív $\ln 2$ számtól eltekintve — a Shannon-entrópia nem szinguláris része, a Ljapunov-exponens és ennek Chang—Wright-féle felső korlátja megegyezik.

További példaként a (9.9) típusú leképezésre azt az esetet tárgyaljuk, amikor

$$S(x) = cx(1-x), \quad |c| \leq 1. \quad (9.22)$$

A leképezés függvényét (9.9) invertálásával kapjuk

$$f(x) = \frac{c+1 - \sqrt{(c-1)^2 + 4c|1-2x|}}{2c}. \quad (9.23)$$

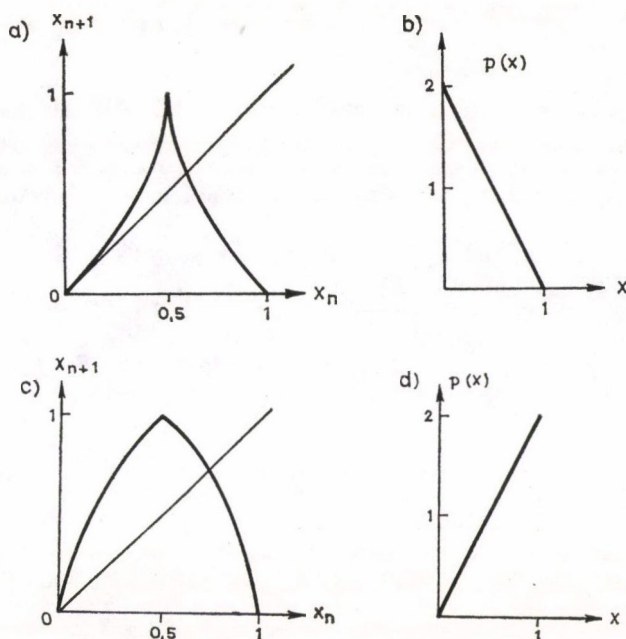
Az általa generált iterációkat (9.14) szerint a

$$P_f(x) = 1 + c(1-2x) \quad (9.24)$$

valószínűség sűrűség jellemzi. A 9.4. a—d. ábrákon bemutatunk két leképezést és a megfelelő valószínűség sűrűség függvényeket.

A közeli trajektóriák exponenciális divergenciáját jellemzi a Ljapunov-exponens, amely (9.17) és (9.24) alapján

$$\bar{\lambda}_f = \ln 2 + \frac{1}{2} - \frac{1}{4c} [(1+c)^2 \ln(1+c) - (1-c)^2 \ln(1-c)]. \quad (9.25)$$



9.4a—d. ábra. A (9.23) leképezés és az iterációt jellemző valószínűség sűrűség függvény; a—b: $c=1$, c—d: $c=-1$.

Ha $c=0$, visszkapjuk a háztető leképezéshez tartozó Ljapunov-exponenst: $\bar{\lambda}_H = \ln 2$. A c paraméter megengedett legnagyobb és legkisebb értékének egyaránt a

$$\bar{\lambda}_f = 1/2, \quad c = \pm 1 \quad (9.26)$$

exponens felel meg.

A Chang—Wright-féle felső korlát a (6.43) definícióból adódik, amelybe ezúttal az

$$M_f = 1/2 + c/4 \quad (9.27)$$

számot helyettesítjük be:

$$L = \ln 2 - \frac{1}{2} \left[\left(1 + \frac{c}{2}\right) \ln \left(1 + \frac{c}{2}\right) + \left(1 - \frac{c}{2}\right) \ln \left(1 - \frac{c}{2}\right) \right]. \quad (9.28)$$

A $c=0$ esetben $L_f = \ln 2$, miként azt el is várjuk, továbbá

$$L_f = \ln 4 - \frac{3}{4} \ln 3 = 0,562335..., \quad c = \pm 1, \quad (9.29)$$

ami valóban majorálja a (9.16) képletben megadott exponenst.

A 4.3.2. fejezetben bemutatott olyan aszimmetrikus leképezéseket, amelyeket a háztető leképezéssel végrehajtott konjugálással megfeleltethetünk a (9.9) típusú rendszereknek. Azt is bebizonyítottuk, az aszimmetrikus leképezéseknek éppen arról a családjáról van szó, amelyek által generált trajektóriák egyenletesen fedik le a $(0, 1)$ intervallumot, elegendően hosszú idő elteltével. Ezúttal konkrétan felírjuk a

(9.18) és (9.23) szimmetrikus leképezésekkel a fenti értelemben ekvivalens aszimmetrikus függvényeket.

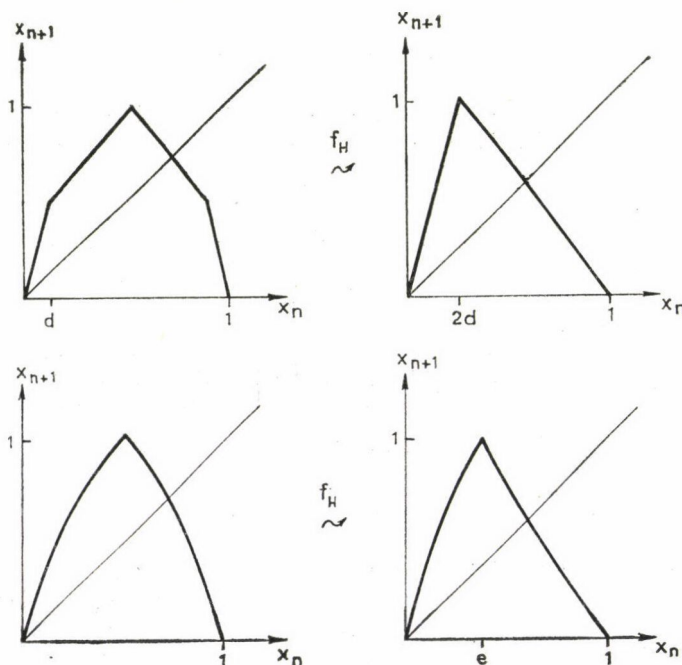
Az előző szakaszban a (9.7b) és a (9.22) kifejezésekkel adott $S(x)$ függvények mellett tárgyaltuk a (9.9) típusú leképezéseket. A 4.3.2. fejezetben a (4.34), (4.38) összefüggések teremtenek kapcsolatot az adott szimmetrikus és a megfelelő aszimmetrikus leképezés között. Mivel az $S(x)$ esetünkben lineáris, illetve négyzetes, azért a (4.34) kifejezéssel adott függvény invertálása egyszerű feladat. Eszerint a (9.18) leképezéssel a

$$g(x) = \begin{cases} x/2d, & 0 \leq x \leq 2d \\ \frac{1-x}{1-2d}, & 2d \leq x \leq 1 \end{cases} \quad (9.30)$$

ferde háztető leképezés ekvivalens, ahol a d változó jelentését a 9.3. ábra mutatja. A parabola ívekből összeállított szimmetrikus (9.23) függvénynek pedig a

$$g(x) = \begin{cases} \frac{c+1-\sqrt{(1+c)^2-4cx}}{c}, & 0 \leq x \leq \frac{2+c}{4} \\ \frac{c-1+\sqrt{(1+c)^2-4cx}}{c}, & \frac{2+c}{4} \leq x \leq 1 \end{cases} \quad (9.31)$$

aszimmetrikus leképezés felel meg. Az alábbi rajzon látható egy-egy pár az ekvivalens függvények e két családjából.



9.5a—d. ábra. Metrikusan ekvivalens leképezések;
a—b: $d=0,125$; c—d: $c=-1/2$, $e=1/2+c/4=3/8$

Megjegyezzük, hogy a metrikus ekvivalencia olyan leképezések között áll fenn ezúttal, amelyeknek megfelelő invariáns mérték függvényeket közvetlenül is meg tudtuk határozni. A megfelelő aszimmetrikus leképezések mindegyikéhez ugyanis a

$$P_{\theta}(x) \equiv 1 \quad (9.32)$$

valószínűség sűrűség tartozik.

Az alábbiakban néhány megjegyzést teszünk a fent tárgyalt egzakt példák alkalmazhatóságának korlátairól.

A vizsgált szimmetrikus, teljesen kifejlődött káoszhoz vezető leképezések közös vonása, hogy maximumuk rendje nem nagyobb egynél. Sima maximum esetén ugyanis (9.9) alapján

$$S'(1) = \infty \quad (9.33)$$

amiből $S(x)$ szimmetriája miatt

$$S'(0) = -\infty. \quad (9.34)$$

Ez viszont az $x=0$ környezetében negatív értékű inverz függvényhez vezetne, amit nem engedünk meg. Bár számos fizikai rendszer kapcsolatba hozható első vagy annál alacsonyabb rendű maximumú leképezésekkel, mégis szigorú megszorításnak tekinthetjük azt, hogy sima leképezéseket nem írhatunk le az előzőek során ismertetett módon.

Egynél kisebb rendű maximum esetén a (9.9) kifejezésből leolvasható, hogy

$$S'(1) = -1, \quad (9.35)$$

azaz

$$S'(0) = 1, \quad (9.36)$$

amiből

$$f'(0) = 1 \quad (9.37)$$

következik. Az $x_{n+1}=x_n$ egyenesre az origóban rásimuló leképezések azonban zinguláris osztályt képeznek. A 4.4. fejezetben láttuk ugyanis, előfordulhat, hogy az $f'(0)=1$ és az $f'(0) \gtrsim 1$ kezdeti deriválttal jellemezhető, egyébként hasonló alakú leképezéseknek egymástól lényegesen különböző valószínűség sűrűség függvények felelnek meg. A sztochasztikus tulajdonságok ilyenkor tehát érzékenyek a leképezés függvényének menetére, ez pedig megnehezíti az empirikus úton kapott leképezések perturbatív vizsgálatát. E tulajdonság miatt a perturbációs számítás szempontjából korlátozott jelentőségűek azok a (9.9) típusú leképezések, amelyek egynél alacsonyabb rendű maximummal rendelkeznek.

9.2.3. Formális egzakt megoldások

Most néhány olyan leképezés típusra térünk ki, amelyeknél a szimmetrikus leképezés inverzét adjuk meg, a leképezés függvényét magát azonban nem írjuk fel zárt alakban.

Térjünk vissza a leképezés inverzének alsó ágára vonatkozó (9.4) egyenletre. Ezúttal csak olyan esetekkel foglalkozunk, amelyeknél az invariáns mérték és a valószínűség sűrűség analitikus függvények a $(0, 1)$ intervallumon. Ilyenkor a $T(x)$ álta-

lában előáll az $(1/2, 1/2)$ pontra nézve ferdén szimmetrikus

$$T_\alpha(x) = \frac{x^{\alpha+1}}{\alpha+1} \frac{\Gamma(2\alpha+2)}{\Gamma^2(\alpha+1)} F(\alpha+1, -\alpha; 2+\alpha; x) \quad (9.38)$$

függvények lineárkombinációjaként. Egyszerűbb esetben egyetlen $T_\alpha(x)$ függvény lép fel, ilyenkor (9.4) alapján formálisan írhatjuk*

$$f_l^{-1}(x) = T_\alpha^{-1} \left[\frac{1}{2} (T_\alpha(x) + S(x)) \right]. \quad (9.39)$$

Az f_l^{-1} függvény felírható trigonometrikus és algebrai függvények felhasználásával az $\alpha = -1/2$ paraméter érték mellett. Ekkor ugyanis

$$T_{-1/2}(x) = \frac{2}{\pi} \arcsin \sqrt{x}, \quad (9.40)$$

és

$$T_{-1/2}^{-1}(x) = \sin^2 \frac{\pi x}{2}. \quad (9.41)$$

Trigonometrikus azonosságok felhasználásával kapjuk a leképezés inverzének kifejezését

$$f_l^{-1}(x) = \frac{1-\sqrt{1-x}}{2} \cos^2 \frac{\pi S(x)}{4} + \frac{1+\sqrt{1-x}}{2} \sin^2 \frac{\pi S(x)}{4} + \frac{\sqrt{x}}{2} \sin \frac{\pi S(x)}{2}. \quad (9.42)$$

A megfelelő f leképezéshez (9.1) alapján a

$$\mu_f(x) = \frac{2}{\pi} \arcsin \sqrt{x} + S(x) \quad (9.43)$$

invariáns mérték és a

$$P_f(x) = \frac{1}{\pi \sqrt{x(1-x)}} + S'(x) \quad (9.44)$$

valószínűség sűrűség tartozik.

Fenti eredményünk összhangban van a perturbációszámítással. Tekintsük ugyanis az $S(x)$ függvényt első rendben kicsinek, s határozzuk meg (9.42) alapján a leképezést első rendig

$$f(x) \approx 4x(1-x) - 2\pi(1-2x)\sqrt{x(1-x)}S(4x(1-x)). \quad (9.45)$$

Vezessük be a

$$\tilde{S}(x) = \pi \sqrt{x(1-x)}S(x). \quad (9.46)$$

Ennek felhasználásával

$$f(x) \approx 4x(1-x) - \tilde{S}(4x(1-x)) \quad (9.47)$$

* E formulának a perturbációszámítás alkalmazása szempontjából lehet jelentősége. A (9.39) függvényt érdemes a perturbálatlan leképezésnek tekinteni, amely maximumának rendjét α segítségével állíthatjuk be.

adódik. Az invariáns mértéket első rendben a perturbációs számítás (6.8) eredménye alapján az

$$\tilde{S}(x) \rightarrow \varepsilon S_1(x), \quad T_1(x) \equiv 0 \quad (9.48)$$

helyettesítéssel kapjuk

$$\mu_f(x) \approx \frac{2}{\pi} \arcsin \sqrt{x} + \frac{1}{\pi \sqrt{x(1-x)}} \tilde{S}(x). \quad (9.49)$$

Az invariáns mérték (9.46) és (9.43) felhasználásával közvetlenül is felírható $\tilde{S}(x)$ -ben első rendig — amely történetesen az egzakt alakkal azonos —:

$$\mu_f(x) = \frac{2}{\pi} \arcsin \sqrt{x} + \frac{1}{\pi \sqrt{x(1-x)}} \tilde{S}(x) \quad (9.50)$$

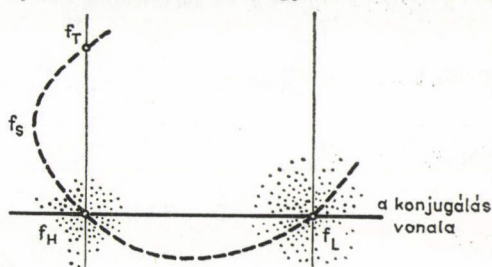
(9.49) és (9.50) összehasonlításából látszik, a perturbatív módszerrel első rendben nyert eredményünk helyes.

10. ÖSSZEFOGLALÁS

Korábban részletesen tárgyaltuk azt a kérdést, milyen körülmények között vezethetők vissza kaotikus viselkedést mutató rendszerek olyanokra, amelyekben teljesen kifejlődött kaosz figyelhető meg. A dolgozatban az egydimenziós diszkrét rendszerekben fellépő teljesen kifejlődött kaosz tulajdonságaival kapcsolatos eredményeinket ismertettük. Ezeket tételeken és Bevezetésben soroltuk fel. Ezúttal egy-egy keretbe foglalva az egzakt és közelítő megoldásokat szemléletes képet adunk róluk.

Feleltessük meg a leképezéseknek a sík pontjait. Mivel a nem szimmetrikus leképezéseket, mint azt megmutattuk, koordinátatranszformáció alkalmazásával szimmetrikussá tehetjük, azért elegendő a szimmetrikus leképezésekkel foglalkoznunk. A vízszintes tengely pontjaihoz hozzárendeljük a háztető leképezéssel ekvivalens függvényeket. Ezek szimmetriája kettős, azaz a leképezések mellett a megfelelő valószínűség sűrűség függvények is szimmetrikusak. A függőleges egyenesek a leképezések olyan családjainak felelnek meg, amelyekhez tartozó valószínűség sűrűségek csupán ferdén szimmetrikus függvényekben különböznek egymástól, szimmetrikus részük azonos.

Mivel a leképezések és a valószínűség sűrűség függvények kapcsolata esetünkben egy-egyértelmű, ezért azt mondhatjuk, a vízszintes tengely pontjaihoz szimmetrikus, a függőlegeséhez ferdén szimmetrikus függvényeket rendelünk. Ekkor egy leképezéshez tartozó valószínűség sűrűség szimmetrikus és ferdén szimmetrikus részét a megfelelő pont „koordinátái” meghatározzák. Az f_H háztető leképezést tekinthetjük az „origó”-nak. A 10.1. ábrán



10.1. ábra. A függvénytér szemléltetése. Az f_H a háztető, az f_L a logisztikus leképezést jelöli. A szaggatott vonal az $f_s(\varepsilon, x) = 1 - |1 - 2x|^{2(1+\varepsilon)}$ függvényeket ábrázolja, míg f_T az $f_s(-3/4, x) = 1 - \sqrt{|1 - 2x|}$ leképezésnek felel meg

az abszcissa olyan leképezéseket jelöl, amelyek tulajdonságai régóta ismertek. A dolgozatban e vonalon kívül eső rendszerek sztochasztikus viselkedését vizsgáltuk.

A leképezések bizonyos osztályaihoz tartozó valószínűség sűrűség függvényeket és magukat a leképezéseket — pontosabban inverzeiket — zárt, egzakt alakban megadtuk. A függvénytérben ezekhez a családokhoz a háztető, ill. a logisztikus leképezésnek megfelelő pontokon átmenő függőleges egyeneseket rendelhetjük hozzá. Megjegyezzük, az „origó”-n átmenő függőleges vonal éppen azokat a leképezéseket reprezentálja, amelyekhez tartozó Ljapunov-exponens az információelméleti entrópia nem szinguláris részének felel meg.

A perturbációs számítás segítségével egy pont kis környezetéhez rendelhető iterációk sztochasztikus tulajdonságai vizsgálhatóak. Részletes számításokat végeztünk a polinom leképezésekre, erre utalnak az f_L logisztikus függvény környezetében sűrűn rajzolt pontok. Az f_H háztető leképezés körüli sorfejtésre is kitértünk. Találkoztunk továbbá olyan esettel, amikor a valószínűség sűrűség korrekcióit nem határozhattuk meg zárt alakban. Ekkor megfelelő numerikus módszer alkalmazására volt szükség a perturbációs számítás magasabb rendjeiben. Ilyen numerikus vizsgálatot az f_L logisztikus leképezés körül végeztünk a szaggatott vonal mentén.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Ezúton fejezem ki köszönetemet *Szépfaľusy Péternek* azért, hogy tanulhattam tőle és vele együtt dolgozhattam. Háľával tartozom *Nagy Károlynak*, az Elméleti Fizika Tanszék vezetőjének, hogy lehetővé tette tette tanszékén e dolgozat elkészítését. Végül itt szeretném *Kerek Margitnak* a kézirat pontos gépelését megköszönni.

A. FÜGGELÉK

Az alábbiakban a master egyenlet k -ad rendű korrekciójában fellépő $F_k(x)$ függvényt írjuk fel. Ehhez a (6.4) egyenlet bal oldalán az ε^k együttható függvényét kell meghatároznunk.

A (6.1) és (6.3b) hatványsor alakok felhasználásával adódik

$$\begin{aligned} \mu(\varepsilon, f(\varepsilon, x)) &= \mu_0(f_0(x) + \varepsilon f_1(x) + \dots) + \varepsilon \mu_1(f_0(x) + \varepsilon f_1(x) + \dots) + \dots = \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \varepsilon^n \mu_n^{[j]}(f_0(x)) \sum_{i_1 \dots i_j=1}^{\infty} \varepsilon^{i_1 + \dots + i_j} f_{i_1}(x) \dots f_{i_j}(x), \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

ahol a $\mu_n^{[j]}(z) = d^j \mu_n(z) / dz^j$ jelölést használtuk. Bevezetve a

$$k = n + i_1 + \dots + i_j \quad (\text{A.2})$$

jelölést, a sort átrendezhetjük:

$$\mu(\varepsilon, f(\varepsilon, x)) = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k [\mu_k(f_0(x)) - F_k(f_0(x))] + 1,$$

ahol $F_0(x) \equiv 1$ és

$$F_k(x) = - \sum_{j=1}^k \sum_{i_1 \dots i_j=1}^{\infty} \frac{1}{a_1! a_2! \dots} f_{i_1}(f_0^{-1}(x)) \dots f_{i_j}(f_0^{-1}(x)) P_{k-i-1}^{[j-1]}(x). \quad (\text{A.3})$$

Itt az

$$l = \sum_{m=1}^j i_m \quad (\text{A.4a})$$

jelölést használtuk. A \sum' szimbólum arra utal, hogy az összegzést a

$$k \equiv \sum_{m=1}^j i_m \quad (\text{A.4b})$$

mellékfeltétel mellett, különböző $\{i_1, \dots, i_j\}$ konfigurációkra végezzük. Konfigurációkat azonosnak tekintünk, ha csupán a bennük fellépő számok sorrendje különbözik. Az a_P az azonos P indexű $f_P(f_0^{-1}(x))$ függvények számát jelöli.

Az $F_k(x)$ kifejezése lényegesen egyszerűsödik, ha

$$f(\varepsilon, x) = f_0(x) + \varepsilon f_1(x). \quad (\text{A.5})$$

Ilyenkor

$$F_k(x) = - \sum_{j=1}^k \frac{1}{j!} P_{k-j}^{[j-1]}(x) f_1'(f_0^{-1}(x)). \quad (\text{A.6})$$

B. FÜGGELÉK

A Ljapunov-exponens (6.38a) hatványsorának együtthatóit adjuk meg az alábbiakban. A (6.1) és (6.3a) sorokat a (6.37) definícióba írva nyerjük

$$\bar{\lambda}(\varepsilon) = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k \int_0^1 P_k(x) \ln |f_0'(x)| dx + \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n \int_0^1 P_n(x) \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-1)^{j+1}}{j} \sum_{i_1, \dots, i_j=1}^{\infty} \varepsilon^{i_1+\dots+i_j} \frac{f_{i_1}'(x) \dots f_{i_j}'(x)}{[f_0'(x)]^j} dx. \quad (\text{B.1})$$

Feltéve, hogy az előforduló integrálok léteznek, a jobb oldalt a

$$k = n + i_1 + \dots + i_j \quad (\text{B.2})$$

változó bevezetésével átalakítjuk. Az ε^k együtthatójaként így

$$\bar{\lambda}_k = \bar{\lambda}_k^{(1)} + \bar{\lambda}_k^{(2)}, \quad (\text{B.3a})$$

$$\bar{\lambda}_k^{(1)} = \int_0^1 P_k(x) \ln |f_0'(x)| dx, \quad (\text{B.3b})$$

$$\bar{\lambda}_k^{(2)} = \sum_{j=1}^k (-1)^{j+1} (j-1)! \sum_{i_1, \dots, i_j=1}^k \frac{1}{a_1! a_2! \dots} \cdot \int_0^1 P_{k-i}(x) f_{i_1}'(x) \dots f_{i_j}'(x) [f_0'(x)]^{-j} dx \quad (\text{B.3c})$$

adódik, az l és Σ' A. Függelékben adott definíciójával. A $k=1$ és $k=2$ esetekben éppen a (6.38c) és a (6.38d) integrálokat kapjuk.

C. FÜGGELÉK

A korrelációs függvény első korrekciójának általános alakját adjuk meg az elkövetkezőkben.

Vezessük be az

$$f^{(\tau)}(\varepsilon, x) = f_0^{(\tau)}(x) + \varepsilon \Delta_{\tau}(x) + O(\varepsilon^2) \quad (\text{C.1})$$

jelölést, ahol $\Delta_{\tau}(x)$ a

$$\Delta_0(x) = 0, \quad (\text{C.2a})$$

$$\Delta_{\tau}(x) = \Delta_{\tau-1}(x) f_0'(f_0^{(\tau-1)}(x)) + f_1(f_0^{(\tau-1)}(x)) \quad (\text{C.2b})$$

rekurziós formulából határozható meg.

A (C.2) egyenlet megoldása

$$\Delta_{\tau}(x) = \sum_{i=0}^{\tau-1} f_1(f_0^{(\tau-i-1)}(x)) \frac{df_0^{(i)}(x)}{dx} \bigg|_{f_0^{(\tau-i)}(x)}. \quad (\text{C.3})$$

Az $\bar{\lambda}(\varepsilon)$ középérték

$$\bar{\lambda}(\varepsilon) = \frac{1}{2} + \varepsilon \int_0^1 x P_1(x) dx + O(\varepsilon^2) \quad (\text{C.4})$$

kifejezése és (C.1) felhasználásával a (6.52) formulából nyerjük

$$C_1(\tau) = \int_0^1 x A_\tau(x) P_0(x) dx + \int_0^1 x f_0^{(1)}(x) P_1(x) - 2 \int_0^1 x P_0(x) dx \int_0^1 x P_1(x) dx. \quad (C.5)$$

A polinom leképezések esetére vonatkozó (6.56) és (6.57) korrelációs függvények levezetésére nézve ld. a [72] hivatkozást.

D. FÜGGELÉK

A kilenc törésponttal rendelkező, szakaszonként lineáris leképezéshez (ld. 9.1. ábra) akkor tartozik a (9.1), (9.7) invariáns mérték, ha teljesülnek az alábbi feltételek:

i) a mérték monoton nő, azaz

$$0 < b < 1/2, \quad |c| < 1/2,$$

$$b/a \geq 2|c|, \quad (1-2b)/(1-2a) \geq 2|c|;$$

ii) az x_0 pontra fennáll

$$T(x_0) + S(x_0) = 2b$$

(ennek alapján belátható, hogy az $f'(0) > 1$ kívánalom ekvivalens az $x_0 > a$ feltétellel);

iii) az $f_1^{-1}(a) \equiv x_1$ pontbeli jobb oldali derivált értéke

$$f'(x_1+0) = \frac{2b}{a(2c + (1-2b)/(1-2a))};$$

iv) attól függően, x_0 az $(a, 1/2]$ vagy az $(1/2, 1]$ intervallumba esik, a leképezés jobb oldali deriváltja az $f_1^{-1}(1/2) \equiv x_2$ pontban

a) $x_0 \in (a, 1/2]$:

$$f'(x_2+0) = \frac{2}{1 + 2c(1-2a)/(1-2b)}$$

b) $x_0 \in (1/2, 1]$:

$$f'(x_2+0) = \frac{b}{2a((1-2b)/(1-2a) - 2c)}.$$

Ha az adott leképezés csak két pontban törik meg, akkor az x_0 egybeesik az $1/2$, $1-a$, illetve az 1 pontok valamelyikével. Ha $x_0 = 1$, akkor ii) miatt $b = 1/2$ azaz i)-ből $c = 0$, triviális esettel állunk szemben. Ha $x_0 = 1/2$ vagy $x_0 = 1-a$, az i)–iv) teljesülését külön meg kell vizsgálni.

IRODALOM

1. H. Haken (szerk.): Chaos and Order in Nature, Springer Berlin, Heidelberg, New York, 1981.
2. H. Haken (szerk.): Evolution of Order and Chaos, Springer Berlin, Heidelberg, New York, 1982.
3. H. L. Swinney and J. P. Gollub (szerk.): Chaotic Behaviour and Fluid Dynamics, Springer Berlin, Heidelberg, New York, 1981.
4. L. Garrido (szerk.): Dynamical Systems and Chaos, Lecture Notes in Physics, Springer Berlin, Heidelberg, New York,
5. R. Stora, G. Iooss, R. H. G. Helleman (szerk.): Chaotic Behaviour in Deterministic Systems, North-Holland Amsterdam, New York,
6. G. Eilenberger, H. Müller—Krumhhaar (szerk.): Nichtlineare Dynamik in kondensierter Materie, KFA Inst. für Festkörperforschung kiadványa, Jülich, 1983.
7. Szépfalussy Péter, Tél Tamás (szerk.): A káosz — véletlenszerű jelenségek nemlineáris rendszerekben, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1982.
8. V. I. Oseledec, Trans. Moscow Math. Soc. 19, 197, 1968.
9. B. V. Chirikov, Phys. Rep. 52, No. 5, 263, 1979.
10. V. I. Arnold, A klasszikus mechanika matematikai módszerei. Műszaki Könyvkiadó.
11. Gnädig Péter, Györgyi Géza, Szépfalussy Péter, Tél Tamás, Bevezetés a káosz kialakulásának és tulajdonságainak elméletébe. A [7] hivatkozási számú könyvben.

12. S. Fishman, D. R. Gempel, R. E. Prange, Phys. Rev. Lett. 49, 509, 1982.
13. B. Derrida, J. P. Eckmann, A. Erzan, Univ. de Genève, preprint, 1982.
14. B. Mandelbrot, Fractals: Form, Chance, and Dimension. W. H. Freeman, San Francisco, California, 1977.
15. O. E. Rössler, a Synergetics című könyvben. Szerk.: H. Haken. Springer Berlin, Heidelberg, New York, 1977.
16. Y. Saito, Dissipative kontinuierliche Systeme. A [6] hivatkozási számú kiadványban.
17. B. A. Huberman, J. Crutchfield, N. H. Packard, Appl. Phys. Lett. 37 — 8, 750, 1980.
18. B. A. Huberman, J. Crutchfield, Phys. Rev. Lett. 43, 1743, 1979.
19. J. B. McLaughlin, J. Stat. Phys. 24, 375, 1981.
20. R. W. Leven, B. P. Koch, Phys. Lett. 86A, 71, 1981.
21. Csákány Antal, szóbeli közlés.
22. O. E. Rössler, Phys. Lett. 57A, 397, 1976.
23. J. Crutchfield, D. Farmer, N. Packard, R. Shaw, G. Jones, R. J. Donnelly, Phys. Lett. 76A, 1, 1980.
24. E. Knobloch, N. O. Weiss, Phys. Lett. 85A, 127, 1981.
25. T. Kai, Phys. Lett. 86A, 264, 1981.
26. B. Hu, S. Zhang, Phys. Lett. 87A, 267, 1982.
27. V. Francheschini, C. Tebaldi, J. Stat. Phys. 21, 707, 1979.
28. E. Ott, Rev. Mod. Phys. 53, 655, 1981.
29. E. N. Lorenz, J. Atmos. Sci. 20, 130, 1963.
30. H. Haken, Phys. Lett. 53A, 77, 1975.
31. R. Graham, Phys. Lett. 58A, 440, 1976.
32. J. A. Yorke, E. D. Yorke, J. Stat. Phys. 21, 263, 1979.
33. S. Thomae, Symbolische Dynamik. A [6] hivatkozási számú kötetben.
34. T. Tél, Z. f. Phys. B49, 157, 1982.
35. M. Giglio, S. Musazzi, U. Perini, Onset of Chaos in Fluid Dynamics. A [2] hivatkozási számú könyvben.
36. B. A. Huberman, A. B. Zisook, Phys. Rev. Lett. 46, 626, 1981.
37. B. A. Huberman, szóbeli közlés.
38. P. S. Lindsay, Phys. Rev. Lett. 47, 1349, 1981.
39. M. J. Feigenbaum, J. Stat. Phys. 19, 25, 1978.
40. M. J. Feigenbaum, J. Stat. Phys. 21, 669, 1979.
41. P. Collet, J.-P. Eckmann, Iterated Maps of the Interval as Dynamical Systems. Birkhäuser Basel, Boston, 1980.
42. M. Misiurewicz, Maps of an Interval. Az [5] hivatkozási számú kötetben.
43. N. Metropolis, M. L. Stein, P. R. Stein, J. Comb. Theory 15, 25, 1973.
44. R. B. May, Nature 261, 459, 1976.
45. S. Grossmann, S. Thomae, Z. f. Naturforschung 32A, 1353, 1977.
46. P. Coullet, C. Tresser, Jour. de Phys. Coll. C5, 25, 1978.
47. T. Kai, K. Tomita, Progr. Theor. Phys. 64, 1532, 1980.
48. G. A. McCreadie, G. Rowlands, Phys. Lett. 91A, 146, 1982.
49. M. Jakobson, Comm. Math. Phys. 81, 39, 1981.
50. Szász. D., Ergodelmélet és káosz. A [7] hivatkozási számú könyvben.
51. Gesztii T., Az ergodelmélet szerepe a statisztikus fizika megalapozásában. A [7] hivatkozási számú könyvben.
52. T. Y. Li, J. A. Yorke, Amer. Math. Monthly 82, 985, 1975.
53. Y. Ruelle, Bull. Soc. Brasil Math. 9, 331, 1978.
54. J. Crutchfield, J. E. D. Farmer, B. A. Huberman, Phys. Rep. 92, 45, 1982.
55. C. W. Smith et. al., Phys. Rev. Lett. 48, 491, 1982.
56. C. Grebogi, E. Ott, J. A. Yorke, Phys. Rev. Lett. 48, 1507, 1982.
57. B. Derrida, J. Phys. C5, 49, 1978.
58. B. A. Huberman, J. Rudnick, Phys. Rev. Lett. 45, 154, 1980.
59. E. N. Lorenz, Annals of the N. Y. Acad. of Sci. 357, 282, 1980.
60. M. J. Feigenbaum, Commun. Math. Phys. 77, 65, 1980.
61. M. Nauenberg, J. Rudnick, Phys. Rev. B24, 493, 1981.
62. H. Daido, Phys. Lett. 83A, 259, 1981.
63. H. Daido, Progr. Theor. Phys. 67, 1698, 1982.
64. Shau-Jin Chang, Jon Wright, Phys. Rev. A23, 1419, 1981.
65. P. Cvitanovic, M. Høgh-Jensen, NORDITA preprint, Nov. 1981.
66. Tél Tamás, Káosz kémiai reakciókban. A [7] hivatkozási számú könyvben.

67. *M. Lücke*, szóbeli közlés.
68. *Shau-Jin Chang, Michael Wortis, Jon Wright*, *Phys. Rev. A* **24**, 2669, 1981.
69. *S. Grossmann, H. Fujisaka*, *Phys. Rev. A* **26**, 1779, 1982.
70. *S. M. Ulam, J. von Neumann*, *Bull. Am. Math. Soc.* **53**, 1120, 1947.
71. *S. Thomae, S. Grossmann*, *J. Stat. Phys.* **26**, 485, 1981.
72. *G. Györgyi, P. Szépfalusi*, *J. Stat. Phys.* **34**, 451, 1984.
73. *S. Ito, S. Tanaka, H. Nakada*, *Tokyo J. Math.* **2**, 211, 1979; **2**, 241, 1979.
74. *H. D. J. Abarbanel, P. E. Latham*, *Phys. Lett.* **89A**, 55, 1982.
75. *T. Geisel, J. Nierwetberg*, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 975, 1981.
76. *T. Geisel, J. Nierwetberg*, *Scaling Properties of Discrete Dynamical Systems*. A [2] hivatkozási számú könyvben.

POLIÉNEK ÉS POLIENIL GYÖKÖK NÉHÁNY FIZIKAI TULAJDONSÁGÁNAK VIZSGÁLATA*

VANCSÓ GYULA

MTA Központi Kémiai Kutató Intézete, Budapest

TARTALOM

1. Bevezetés	292
2. Irodalmi rész	293
2.1. Poliének ($C_{2n}H_{2n+2}$) és polienil gyökök ($C_{2n+1}H_{2n+3}$) elektronszerkezete	293
2.2. Poliének optikai spektruma	298
2.2.1. Rövid konjugációs hossz: poliének degradált PVC mátrixban	298
2.2.2. Hosszú poliének: poliacetilén	299
2.3. Konfiguráció	300
2.3.1. A poliacetilén cisz-transz izomerizációja	301
2.4. Vezető polimerek	303
2.4.1. Elektromos vezetés poliacetilénben	304
2.5. A PVC degradációja	306
2.6. Polienil gyökök ESR spektruma	309
2.6.1. Az ESR spektrum alapján történő konjugációs hossz becslés pontossága	311
2.7. A vizsgált polimerek infravörös spektruma	313
3. Kísérleti rész	316
3.1. A vizsgált anyagok	316
3.1.1. Degradált PVC minták	316
3.1.2. A poliacetilénnek és származékainak előállítása	316
3.2. Vizsgálati módszerek	319
3.2.1. ESR mérések	319
3.2.2. Az UV-látható spektrum mérése	320
3.2.3. Az infravörös spektrumok mérése	321
3.2.4. A mikrohullámú vezetőképesség és a dielektromos állandó mérése	321
4. A mérési eredmények és értelmezésük	321
4.1. A termikusan degradált PVC ESR vizsgálata: rövid polienil gyökök	321
4.2. ESR vizsgálatok poliacetilénben	327
4.2.1. Az ESR spektrumok jellemzői	327
4.2.2. A transz (CH) $_x$ ESR spektruma: hosszú polienil gyökök	329
4.2.3. A termikusan aktivált cisz-transz izomerizáció követése	330
4.2.4. A poliacetilén ESR jelének telítési tulajdonságai	332
4.2.5. A poliacetilén hengerlés hatására bekövetkező cisz-transz izomerizációja	335
4.2.6. Az izomerizáció mechanizmusa az ESR vizsgálatok alapján	338
4.3. Jóddal szennyezett poliacetilén elektromos és dielektromos tulajdonságai	339
5. Összefoglalás	343
6. Köszönetnyilvánítás	348
Irodalom	348
Előadások	350
Közlemények	350

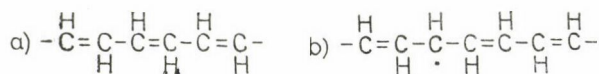
* Érkezett 1983. jún. 17. Egyetemi doktori értekezés.

1. BEVEZETÉS

Doktori értekezésemben a poliacetilént alkotó, illetve a degradált poli(vinil klorid) láncban található poliénekre és polienil gyökökre vonatkozó vizsgálatainkat ismertetem.

Poliéneknek az olyan szénhidrogéneket nevezik, melyek több, váltakozva telített (egyes), illetve telítetlen (kettős) szén-szén kötést tartalmaznak. Az elágazásoktól mentes, véges polién lánc kémiai összegképlete $C_{2n}H_{2n+2}$. A $C_{2n+1}H_{2n+3}$ képlettel jellemezhető, ún. páratlan alternáló poliénlánc egy párosítatlan spinű elektront tartalmaz. Az ilyen paramágneses poliének a polienil gyökök. A poliének kettős kötéseiben σ és π , az egyes kötésekben pedig σ elektronok vesznek részt. A szomszédos π elektronok kölcsönhatása az ún. konjugációs kölcsönhatás. A konjugált, telítetlen szén-szén kettős kötések száma a lineáris polién konjugációs hossza.

Az alábbi ábrán az $n=3$ konjugációs hosszal rendelkező polién, illetve polienil gyök szekvencia szerkezeti képletét mutatjuk be:



$n=3$ konjugációs hosszú polién (a), illetve polienil gyök (b)
szekvencia kémiai szerkezeti képlete.
A párosítatlan spinű elektront (\cdot) jelöli

Számos, poliéneket, illetve polién vázú szénláncot tartalmazó vegyület ismeretes. A természetben megtalálható, létfontosságú poliéneket tartalmazó molekulák a terpének, politerpének és a karotinoidok csoportjába tartoznak (β -karotin, A-vitamin, likopén stb.)

Szintetikus makromolekulák is tartalmaznak poliéneket. Az elmúlt években az ilyen, konjugált kötésrendszereket tartalmazó, szerves polimerek vizsgálata fokozott érdeklődést váltott ki. Ez több okra vezethető vissza.

Elméleti számítások alapján konjugált szénláncot és könnyen polarizálható oldalcsoportokat tartalmazó makromolekula magas hőmérsékleten is szupravezető lehet. Az erre vonatkozó elméleti kutatásokhoz az elmúlt években széles körű kísérleti munka kapcsolódott. Ennek során a legtöbbet vizsgált polimer a poliacetilén, — $(CH)_x$ — amit nagy konjugációs hosszú, kristályos poliének alkotnak. A poliacetilén számos, rendkívül érdekes tulajdonsággal rendelkezik. Elektrondonorokkal, illetve akceptorokkal szennyezett származékai az eddig ismert legnagyobb elektromos (esetenként fémes) vezetőképességet mutató szerves polimer rendszerek. Bár a polimer a polarizálható oldalcsoportok hiánya miatt nagyon alacsony hőmérsékleten sem szupravezető, néhány tulajdonsága alapján a gyakorlati életben is számos fontos területen alkalmazható. Így pl. felhasználásával igen jó paraméterekkel rendelkező akkumulátorok, napelemek, félvezető $p-n$ átmenetek készíthetők, sőt mesterséges holdak felületének elektrosztatikus árnyékolására is alkalmazható.

A poliének tulajdonságainak tanulmányozása különböző polimerek degradációjának (lebomlásának) megismerése szempontjából is igen jelentős. Ismeretes ugyanis, hogy néhány nagy mennyiségben felhasznált ipari, vinil típusú polimer, például a poli(vinil klorid) — PVC — degradációja folyamán a makromolekuláris mátrix-

ban polién szegmensnek képződnek. Ezek különböző, pl. optikai, mágneses, elektromos jellemzői, kémiai reakciói stb. a degradálódott polimer tulajdonságait nagymértékben befolyásolják. A vonatkozó ismeretekből következtetések vonhatók le a degradáció mechanizmusával és a polimernek a degradáció elleni stabilizálásával kapcsolatban is.

2. IRODALMI RÉSZ

2.1. Poliének ($C_{2n}H_{2n+2}$) és polienil gyökök ($C_{2n+1}H_{2n+3}$) elektronszerkezete

Mint a bevezetésben már szó volt róla, a konjugált szénláncú molekulákban a kettős kötések egyszeres kötések választják el egymástól. Az ilyen szerkezetű molekulában a szén-szén kötések vegyértékelektronjai σ és π pályákon vannak. A σ -kötésekben az elektronok lokalizáltak, a π -pályákon viszont delokalizáltak, több centrumú molekulapályán mozognak. A konjugáció miatt a szomszédos elektronok hullámfüggvénye a lánc mentén egymással elég erős átfedésben van. Az elektronok tulajdonságai az elektron molekulapálya elmélet segítségével jól leírhatók. Ezen számítások alapján a konjugált rendszer lényeges fizikai paramétereire, pl. az optikai, mágneses és elektromos tulajdonságaira vonatkozó információk nyerhetők.

A konjugált poliének elektronszerkezetére vonatkozóan számos kovantumkémiai számítást végeztek. Salem [1], Murrel [2], Murrel [3] munkáiban a számítási módszerek és a kapott fontos eredmények összefoglalása megtalálható.

A π -elektronok molekulapálya elméleti tárgyalása különböző közelítő módszerek alkalmazásával lehetséges. Az egyik gyakran alkalmazott egyszerű közelítés az ún. LCAO molekulapályát alkalmazó számítási módszer Hückel tárgyalásban (Murrel [3]).

A LCAO közelítésben olyan Ψ molekulapályákkal számolnak, melyek a Φ_v , v -ik atomhoz tartozó elektronpályák lineáris kombinációi, azaz

$$\Psi = \sum_v c_v \Phi_v. \quad (2.1)$$

Esetünkben a polién lánc C atomjai sp^2 hibrid állapotúak, a lánc mentén a π elektron molekulapályák pedig $2p_z$ atomi pályák lineáris kombinációi.

A Hückel közelítés az LCAO módszer energia sajátértékekre vonatkozó szekuláris mátrix elemeire további feltevéseket tartalmaz. Ezek a következők:

$$1. \quad \int \Phi_\mu \Phi_\nu dV = 0, \quad \text{ha} \quad \mu \neq \nu$$

$$2. \quad \int \Phi_\mu \hat{H} \Phi_\nu dV = \alpha$$

az úgynevezett Coulomb integrál minden atomra.

$$3. \quad \int \Phi_\mu \hat{H} \Phi_\nu dV = \beta$$

a rezonancia integrál $\mu-\nu$ szomszédos atomok esetén, minden μ atomra.

Ekvidisztáns láncan egy, alternáló lánc esetén értelemszerűen két különböző rezonancia integrál, β_1 , illetve β_2 létezik.

$$4. \quad \int \Phi_\mu \hat{H} \Phi_\nu dV = 0 \quad \text{ha} \quad \mu-\nu \text{ atomok nem szomszédosak.}$$

Ekvidisztáns, „ n ” konjugációs hosszú lineáris polién, $C_{2n}H_{2n+2}$ esetén — (a) eset — az r -ik molekulapálya energiája Hückel közelítésben:

$$E_r = \alpha + 2\beta \cos \frac{r\pi}{2n+1}. \quad (2.2)$$

Alternáló lánc esetén — (b) eset — a fenti kifejezés módosul. A kötő pályákra

$$E_r = \alpha - (\beta_1^2 + \beta_2^2 + 2\beta_1\beta_2 \cos \theta_r)^{1/2} \quad (2.3)$$

a $2n-r$ lazító pályákra pedig

$$E_{2n-r} = \alpha + (\beta_1^2 + \beta_2^2 + 2\beta_1\beta_2 \cos \theta_r)^{1/2} \quad (2.4)$$

ahol θ_r az alábbi transzcendens egyenlet megoldása:

$$\beta_2 \sin(n+1)\theta + \beta_1 \sin n\theta = 0$$

A $\Psi_n \rightarrow \Psi_{n+1}$ gerjesztés energiája az (a), illetve a (b) esetben:

$$\Delta E(a) = -4\beta \sin \frac{\pi}{4n+2} \quad (2.5)$$

$$\Delta E(b) = 2(\beta_1^2 + \beta_2^2 + 2\beta_1\beta_2 \cos \theta_n)^{1/2} \quad (2.6)$$

A $C_{2n+1}H_{2n+3}$ lineáris polienil gyököknek egy párosítatlan elektronja így egy félig betöltött, nem kötő molekulapálya van. Nagy konjugációs hosszak esetén a polienil gyökökben a poliénekhez hasonlóan szintén kötésalternáció lép fel (Salem [1]).

Az első gerjesztési energiák értékeiből látható, hogy az ekvidisztáns láncra vonatkozó Hückel közelítésben $n \rightarrow \infty$ esetén $E(a) \rightarrow 0$. Az alternáló szénláncra vonatkozó modellben $E(b) \rightarrow \varepsilon$ véges értékhez tart. Hosszú alternáló szénlánc esetén a kötő és a lazító pályák között gap nyílik. A tiltott sáv megjelenése a fizikai jellemzőkre, így az első optikai gerjesztési sávra és az egyenáramú vezetőképességre döntő hatással van.

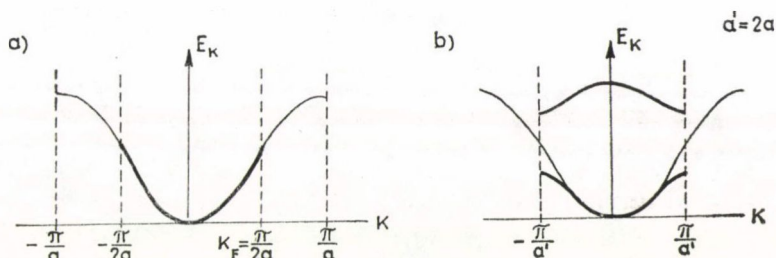
Nagyon hosszú (végtelennek tekinthető) polienil gyök, illetve polién lánc esetén a gap megjelenése miatt az első optikai gerjesztési sáv véges hullámhosszhoz tartozik. A polienil gyökök párosítatlan spinű elektronjának energiaszintje a tiltott sáv közepén van. Ekvidisztáns lánc — (a) eset — $n \rightarrow \infty$ $E(a) \rightarrow 0$ miatt a $\Psi_n \rightarrow \Psi_{n+1}$ átmenet végtelen nagy hullámhosszhoz tartozna. Kuhn [4] volt az első, aki poliének optikai spektrumának elemzése során rámutatott, hogy a hosszú poliénekben mért véges abszorpciós frekvenciákat csak alternáló lánc feltételezésével lehet értelmezni. α - ω dimetilpoliének optikai spektruma szintén csak alternáló lánc, azaz a (b) modell segítségével magyarázható (Murrell [3]). Az optikai mérések alapvető fontosságú bizonyítékot jelentenek arra vonatkozóan, hogy poliénekben kötésalternáció van jelen.

Mind az (a), mind a (b) esetben növekvő n mellett az elektron energiaszintek távolsága csökken, ami a kvázifolytonos π -elektron energiasáv kialakulásához vezet. Ekvidisztáns szénatomokból álló poliének π elektronsávja félig betöltött. Ha bekövetkezik a polién ún. dimerizációs rástorzulása (kötésalternáció lép fel, emiatt a szén-szén kötéstávolságok váltakozva hosszabbak, illetve rövidebbek lesznek, a rácsállandó így megduplázódik és a translációs egység egy $-\text{CH}=\text{CH}-$ csoport

lesz), a zónahatár a rácsállandó duplázódása miatt az eredeti Fermi impulzushoz kerül. Mivel az eredeti sáv félig volt betöltve, az új zónahatár a Fermi energiához esik. Ismert, hogy az energia diszperziós görbe a zónahatárra merőleges érintővel kell hogy befusson. A Fermi felület közelében levő betöltött állapotok ezért a dimerizálódott rendszerben mélyebbre kerülnek. Az eredeti és a dimerizálódott lánchoz tartozó $E=f(k)$ diszperziót a 2.1. ábrán szemléltetjük. A rácsstorzulás következtében módosuló elektron sáv szerkezet változás energia felszabadulást eredményez. Ha a felszabaduló energia fedezi a rácsstorzuláshoz szükséges energiát, a dimerizáció létrejön. Ez az ún. Peierls-torzulás (Peierls [5]), a közel egydimenziós rendszerekre jellemző instabilitás.

Mivel a dimerizálódott, Peierls-torzult rácsban a Fermi felület a tiltott sávba esik, a jó elektromos vezetőképesség kialakulásának egyik alapvető feltétele, a nagy elektron mobilitás az ilyen rendszerekben nem teljesül. (Ez az oka pl. annak, hogy a szennyezetlen poliacetilén rossz elektromos vezető.)

A Peierls-torzulás általánosabban megfogalmazva egy részlegesen betöltött vezetési sávval rendelkező rendszer rácsstorzulással szembeni instabilitása. A rácsstorzulás során a rácsperiódus úgy változik meg, hogy az új periódusnak megfelelő sáv szerkezetben a Fermi energiánál gap nyílik.

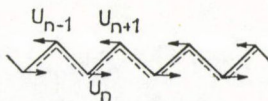


2.1. ábra. Peierls torzulás félig betöltött sávval rendelkező 1 D láncon. (a) az energia diszperzió ekvidisztáns, és (b) dimerizálódott láncon. Az utóbbi esetben a zónahatárok $\pm\pi/2a$ -nál vannak. Látható, hogy ekkor a Fermi felület közelében levő állapotok mélyebbre kerültek.

Su [6] és munkatársai a szén-szén kötéstávolságok megváltozásának (pl. dimerizáció) a hosszú poliének elektronszerkezetére gyakorolt hatását vizsgálták. Az alábbiakban munkájuk legfontosabb eredményeit mutatjuk be.

A számítások során azonos szén-szén kötéstávolságú polién láncból indultak ki. A kötéstávolság változások hatásának leírása céljából úgynevezett konfigurációs koordinátát, u_n -t vezettek be. Az u_n a poliénlánc n -ik szénatomjának az ekvidisztáns láncban elfoglalt helyéhez viszonyított előjeles elmozdulása a lánc hosszának irányában.

ekvidisztáns lánc



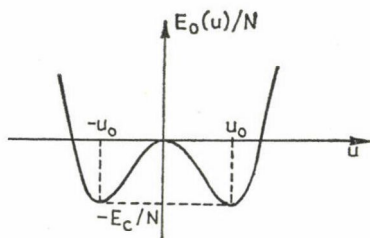
torzult lánc



Kétféle, rövidebb „kettős” és hosszabb, egyes szén-szén kötést tartalmazó, dimerizált lánc esetén az n -ik szénatom elmozdulása

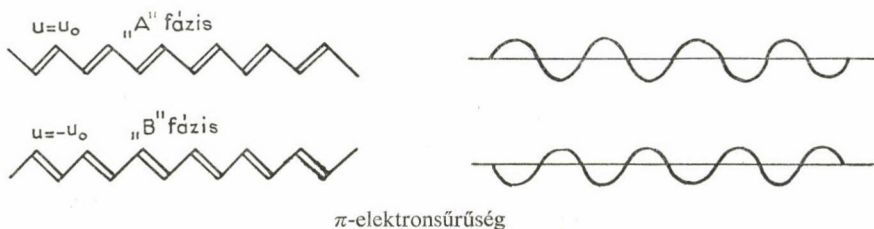
$$u_n = (-1)^n u_0 \quad (2.7)$$

A számítások szerint az egy CH egységre jutó $E_0(u)$ energia az u atomi elmozdulások függvényében:



2.2. ábra. Az $E(u)$ görbén $u = \pm u_0$ -nál két abszolút minimum, $u = 0$ -nál pedig egy lokális maximum van. Az $u = 0$ esetnek ekvidisztáns, az $u = \pm u_0$ -nak dimerizálódott polién lánc felel meg. Az ekvidisztáns lánc az energiagörbe lokális maximuma miatt instabil a dimerizálódott láncokhoz képest. Ez az instabilitás a korábban vázolt Peierls torzulás. A dimerizálódott, stabilis láncban a szén-szén kötéshossz változása az ekvidisztáns esethez képest $\sqrt{3}u_0 = 0,0073$ nm. Az $|E_c| = 0,015$ eV a CH egységre eső π -elektron kondenzációs energia

A polién lánc alapállapota az energiagörbe szerint kétszeresen degenerált:



π -elektronsűrűség

Az „A” fázisú lánc mentén a π -elektronsűrűség a „B” típusú láncokhoz képest 180° fáziskülönbséggel van eltolva.

Az alapállapot kétszeres degenerációja miatt elegendően hosszú polién láncon az „A” és a „B” fázist elválasztó, véges hosszúságú „gerjesztések”, kötéalternálási hibák képződhetnek:



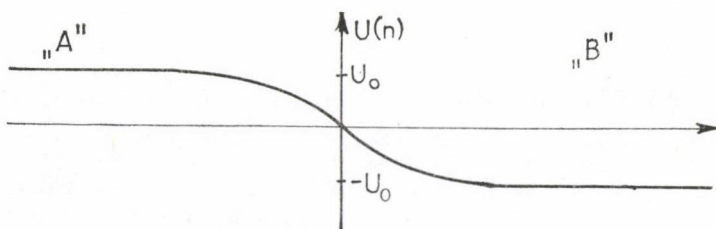
Mivel az „A” és „B” esetben a π -elektronok fázisa 180° -kal különbözik, a kötéalternálási hibát π -fáziskönyököknek is nevezik.

A π -fáziskönyök szénatomjainak az ekvidisztáns láncokhoz viszonyított elmozdulása a szénatom fáziskönyökben elfoglalt helyének függvénye.:

$$u(n) = u_0 (-1)^n \tan h(n/l) \quad (2.8)$$

Az l paraméter a kötéalternálási hiba konjugációs hossza.

A π -fáziskönyök energiája, $E(l)$, a hiba kiterjedésének függvényében az $E_g \pi$ -elektron tiltott sáv szélességet, mint paramétert tartalmazza (2.4. ábra).



2.3. ábra. Kötésalternálási hiba: a szomszédos szén-szén kötéshosszak különbsége a szénatomok sorszámanak (n) függvényében

Poliacetilénben a tiltott sáv szélessége 1,4 eV. Az ehhez az értékhez tartozó $E(I)$ görbe minimumhelye, a π -fáziskönyvek konjugációs hossza $l=7$. (Megjegyezzük, hogy más számolások, így Kertész [7] szerint az l konjugációs hossz poliacetilénben 12–14 is lehet. Számszerű értéke némiképpen függ az alkalmazott számítási módszertől és méretkritériumtól.)

A kötésalternálási hiba energiaszintje a tiltott sáv közepére esik. A betöltés függvényében a spinje és elektromos töltése a következő:

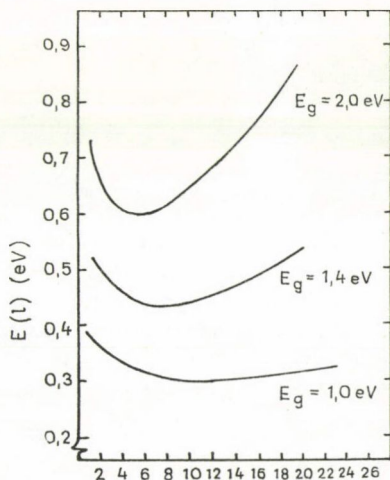
betöltés	0	1	2
spin	0	1/2	0
elektr. töltés	+e	0	-e

Az elektromos töltéssel rendelkező fáziskönyvek diamágneses, a semleges töltésű pedig paramágneses.

A paramágneses π -fáziskönyvek így a korábbi elnevezést használva egy polienil gyök. A polienil gyökben $n=0$ helyen (a gyök, vagyis a fáziskönyvek „közepén”) maximális a spinsűrűség és $u(0)=0$ azaz a középső szénatomok egyenlő távolságra vannak. $u=0$ -tól „jobbra” és „balra” $u(n)$, azaz a kötésalternáció nő, a spinsűrűség pedig csökken.

A paramágneses π -fáziskönyvek hosszú polién láncan történő elmozdításához $\Delta E_s \sim 0,002$ eV aktiválási energia szükséges. Ez a kicsi ΔE_s érték azt jelenti, hogy a polienil gyök 20–40 K hőmérsékleten már mozgékony. Ennek megfelelően az ESR spektruma — melynek jellemzőit a 2.6. fejezetben tárgyaljuk — keskeny, Lorentz görbe alakú szinglett jelből áll.

A paramágneses π -fáziskönyvek mozgása analóg a ferromágneses deméneket elválasztó Bloch falak mozgásával. A helyváltoztatás során a lokális $u(n)$ függés a π -fáziskönyvön belül nem változik: a kötésalternálási hiba mozgása során alakját megőrzi. Emiatt a tulajdonsága miatt szolitonnak is nevezik. A szoliton magányos, általában nemlineáris és diszperzív rendszerekben kialakuló olyan $\Phi_s(\xi)$ egyhullám,



2.4. ábra. A kötésalternálási hiba energiája a hiba konjugációs hosszának függvényében

mely a $\xi \rightarrow (-\infty)$ aszimptotikus állapotából a $\xi \rightarrow (+\infty)$ aszimptotikus állapotába való átmenete közben lényegében ξ -ben van lokalizálva.

Végül megjegyezzük, hogy az elektromosan töltött π -fáziskönyök hosszú poliéneket tartalmazó polimerek (poliacetilén) vezetési mechanizmusában játszhat igen lényeges szerepet. Félvezető jellegű, aktivált elektromos vezetés esetén ugyanis a töltéshordozók keltéséhez szükséges energia — a gap szélességének fele — jóval nagyobb, mint az elektromosan töltött π -fáziskönyök képződéséhez szükséges energia. Az előbbi értéke a $(\text{CH})_x$ -ben 0,7 eV, míg az utóbbi az $E(I)$ függvény alapján 0,4 eV. A szolitonok, mint töltéshordozók útján történő elektromos vezetésről a poliacetilén vezetőképességéről szóló fejezetben részletesen szólunk.

2.2. Poliének optikai spektruma

2.2.1. Rövid konjugációs hossz: poliének degradált PVC mátrixban

Mint azt a poliének elektronszerkezetéről szóló fejezetben megmutattuk, az első $\pi - \pi^*$ elektrongerjesztési sáv energiája a poliének konjugációs hosszának (n) függvénye (294. old.). Növekvő konjugációs hosszal az optikai gerjesztési sáv energiája csökken (a gerjesztés hullámhossza nő), $n \rightarrow \infty$ esetben pedig (kísérleti adatok alapján) véges értékhez tart. Az elméleti számítások szerint [294. old. (2.5) és (2.6)] a gerjesztési energiák a rezonancia integrálok értékeitől függenek.

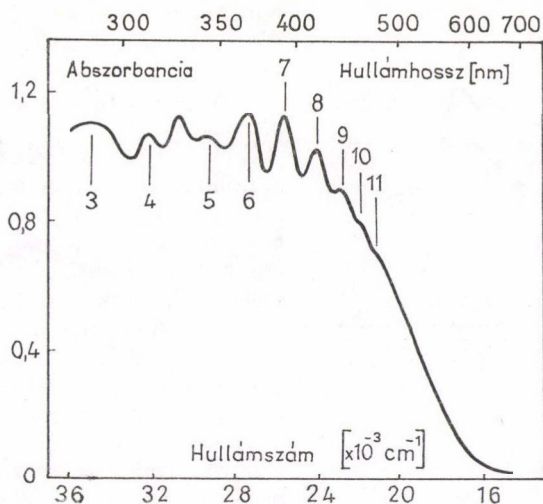
A degradált PVC a poliének képződése miatt elszíneződik. A szín eltérő hosszúságú poliének spektrumának összegződése révén alakul ki. A különböző konjugációs hosszú poliénekhez tartozó elnyelési sávok azonban az optikai spektrumban $n \leq 11-12$ -ig megkülönböztethetők. Ezt a 2.5. ábrán, egy degradált PVC pornak a méréseink során oldatban felvett, jellemző UV—VIS spektrumának segítségével szemléltetjük.

Az n konjugációs hosszú poliének monomer egységre vonatkozó p_n koncentrációja az UV—VIS optikai spektrum felhasználásával kiszámítható. Oldat spektrum esetén ugyanis

$$P_n = \frac{\epsilon M}{\epsilon_n c l},$$

ahol ϵ a mért abszorbanca, M a monomer egység tömege, c a polimer oldat koncentrációja (gramm/liter), l az optikai úthossz, ϵ_n pedig az n konjugációs hosszú polién moláris abszorpciós koefficiense (Nagy [8]).

Különböző konjugációs hosszú poliének moláris abszorpciós koefficienseit Popov [9] és Szmirnov határozták meg. Az egyes poliének p_n koncentrációjának meghatározása lehetővé teszi a poliének eloszlásfüggvényének és átlagos konjugációs hosszának vizsgálatát is.



2.5. ábra. Degradált PVC optikai spektruma. Az egyes elnyelési maximumokhoz tartozó konjugációs hosszakat az ábrán megjelöltük. A degradációt 200 °C-on, Ar atmoszférában végeztük, a lehasadt hidrogénklorid konverzió 1%.

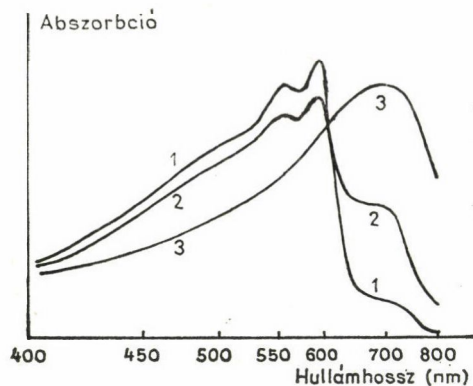
2.2.2. Hosszú poliének: poliacetilén

Amint megmutattuk (294. old.) a poliének hosszának növekedésével az első $\pi \rightarrow \pi^*$ gerjesztési sáv energiája véges határértékhez tart. Ezen határérték meghatározása céljából Shirakawa [16] és munkatársai $\text{H}-(\text{CH})_{2n}-\text{H}$ poliének optikai spektrumát vizsgálták. A $\pi \rightarrow \pi^*$ gerjesztés mért hullámszáma és a Hückel közelítésben számolt E gerjesztési energia között lineáris összefüggést találtak. Eredményük szerint a végtelenre extrapolált konjugációs hosszú polién legalacsonyabb $\pi \rightarrow \pi^*$ optikai gerjesztéséhez 703 nm hullámhossz tartozik. Ez megközelíti a transz $(\text{CH})_x$ -en mért 700 nm-es értéket. (A poliének szerkezeti, ún. izomer módosulatairól, a cisz és a transz poliénekről a következő fejezetben szólunk.) Az optikai spektrum alapján tehát azt állíthatjuk, hogy a transz módosulatú poliacetilén polién szegmensei nagy konjugációs hosszal rendelkeznek.

A 2.6. ábrán Shirakawa [10] és társai munkája alapján a nagy konjugációs hosszú polién szekvenciákból álló poliacetilén optikai spektrumát mutatjuk be, különböző cisz-transz arányok mellett.

Az abszorpciós maximum a cisz poliacetilén esetén 594 nm-nél (1), a transz izomer módosulatnál (3) 700 nm-nél jelentkezik. A cisz-transz kompozíció spektruma (2) a kétféle izomer spektrumának eredője.

A cisz módosulatban a hidrogén atomok egymáshoz képest közeli, illetve távoli helyzetben lehetnek (300. old.). A közeli H atomok szterikusan taszítják egymást. Ez feszülést (enyhe csavarodást) okoz a cisz $(\text{CH})_x$ láncban, aminek következtében a π elektronok lokalizációja a cisz poliacetilénben erősebb, mint a transz módosulat-



2.6. ábra. A poliacetilén optikai spektruma (Shirakawa [10]). (1) — cisz (CH)_x (2) — részlegesen izomerizált cisz (CH)_x (3) transz (CH)

gű. Az optikai anizotrópiát Fincher [11] részben orientált poliacetilén reflexiós spektruma alapján, közvetlen kísérleti úton is igazolta.

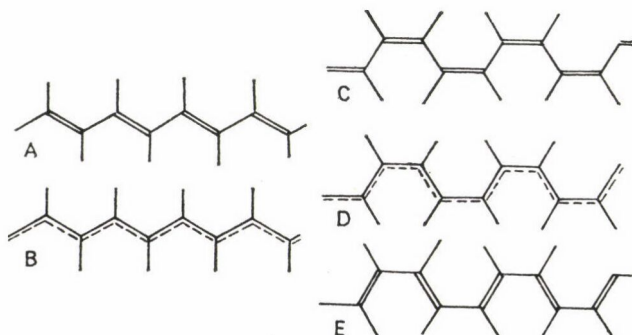
ban. Ez az oka annak, hogy a cisz izomer $\pi \rightarrow \pi^*$ optikai gerjesztési energiája nagyobb.

A poliacetilén π -elektron sáv szerkezetének vizsgálata céljából Fincher [11], [12] és munkatársai részletesen vizsgálták a polimer optikai és infravörös spektrumát a 4,0—0,1 eV tartományban. Eredményeik szerint a transz (CH)_x a lánc menti gerjesztésnek megfelelő $E_g = 1,4$ eV szélességű, direkt tiltott sávval rendelkező félvezető. Az optikai abszorpció maximuma az $E_g - W_{\perp}$ értéknél van, ahol W_{\perp} a láncok közötti csatolás. A rezonancia integrál a lánc mentén $\beta_{\parallel} \approx 2$ eV, míg a láncra merőlegesen $\beta_{\perp} \approx 0,1$ eV. A π elektron transzfer anizotrópia láthatóan nagy, a sáv szerkezet „egydimenziós” jellegű.

2.3. Konfiguráció

Egy molekula atomjainak térbeli, a szabad rotáció vonatkozásában gátolt elhelyezkedését, térszerkezetét nevezzük az illető molekula konfigurációjának. Azonos összegképletű molekuláknak különböző lehet a szerkezete. Ezek az eltérő szerkezetű specicsenek a különböző izomerek. Kettős kötéssel kötött szénatomokhoz kapcsolódó csoportok viszonylagos térbeli helyzete kétféle lehet: közeli (cisz) vagy távoli (transz).

A poliéneket a konjugált kettős kötésű elektronrendszer rezonancia energiája stabilizálja. A rezonancia energia planáris molekulák esetén maximális, ezért a poliének általában planáris molekulák. A lehetséges izomer módosulatokat a 2.7. ábrán mutatjuk be.



2.7. ábra. Poliének lehetséges izomer módosulatjai

A 2.7. ábrán látható szerkezetek közül az (A) és a (B) transz vázú transz-transzoid. A (C), a (D) és az (E) cisz vázú láncok, a (C) cisz-transzoid, az (E) pedig transz-ciszoid szerkezet. A (B), illetve a (D) vázakban a szén-szén kötéstávolságok egyenlők. (A transz vagy a cisz elnevezéshez fűzött -id toldalék egyes kötésre vonatkozó szimmetriát jelöl.)

Amint azt korábban megmutattuk, a poliének alternáló szén-szén kötések tartalmazznak, így (A), (C) vagy (E) szerkezetűek lehetnek. A két cisz vázú izomer módosulat, a (C), illetve az (E) közül csak az egyik rendelkezik fizikai realitással. Mivel a szén-szén kettős kötések rövidebbek az egyszeres kötésekénél, a (C) és az (E) lánc egy-egy elemi cellája egymással semmilyen szimmetria művelet segítségével nem hozható fedésbe. Így csoportelméleti okokból a két cella energiatartalma különböző kell hogy legyen. *Yamabe* [13] sáv szerkezet számításai alapján a (C) cisz-transzoid az (E)-vel jelölt transz-ciszoid módosulatnál energetikailag stabilabb.

Szerkezetvizsgálati módszerekkel dönthető el, hogy egy adott polién rendszerben melyik izomer módosulat valósul meg. Normál koordináta analízis alapján (*Shirakawa* [14]) az infravörös spektrumban a transz poliének három C—H rezgése, a cisznek öt C—H és két C—C rezgése aktív, így a két izomer egymástól könnyen megkülönböztethető. Azonosításra a láncsíkokra merőleges rezgéseket használják (*Ito* [15]). Megjegyezzük, hogy a szintetikus és a természetben előforduló poliének kevés kivételtől eltekintve transz transzoid szerkezetűek (hivatkozások *Ito* [15] munkájának irodalomjegyzékében).

A labilis cisz szerkezetnek a transz módosulatú formába történő átalakulása az ún. cisz-transz izomerizáció. Erről a jelenségről írunk a következő részben.

2.3.1. A poliacetilén cisz-transz izomerizációja

Mint említettük, egy polién mátrix, így pl. a $(\text{CH})_x$ cisz-transz összetétele infravörös spektroszkópia alkalmazásával közvetlenül és kényelmesen meghatározható. A C—H síkra merőleges deformációs rezgési sáv helye a spektrumban cisz izomer esetén 740 cm^{-1} , transz módosulatban pedig 1015 cm^{-1} . Ezeknek a rezgéseknek az abszorbanciái alapján a transz tartalom (*Ito* [15]):

$$\text{transz } [\%] = 100 [A_{\text{transz}} / (1,30 A_{\text{cisz}} + A_{\text{transz}})]$$

(Külön fejezetben tárgyaljuk a $(\text{CH})_x$ IR spektrumának néhány jellemzőjét.)

A $(\text{CH})_x$ cisz-transz összetétele a polimerizáció hőmérsékletének függvénye. A szokásos polimerizációs körülmények mellett (316. old.) a reakció során az acetilén monomer hármas kötése cisz irányban nyílik fel. A polimerizáció folyamán cisz izomer képződik. Transz szegmensnek létrejötté irreverzibilis, aktivált jellegű cisz-transz izomerizáció következménye. A naszcens cisz polimer már viszonylag alacsony hőmérsékleten mérhető sebességgel a stabilis transz módosulatba alakul át.

Mint említettük, a cisz módosulatban a szomszédos, közeli H atomok közötti szterikus taszítás miatt a cisz lánc síkjának kis mértékű „csavarodása”, torzulása várható. (A „csavarodás” a cisz láncról készített molekulamodell fényképén (345. old.) is megfigyelhető.) Ez kisebb mértékű elektron delokalizációt, nagyobb π -elektron tiltott sávzélességet, és kisebb termodinamikai stabilitást eredményez a transz

módosulathoz képest. A nagyobb tiltott sávszélesség miatt a cisz $(CH)_x$ elektromos vezetőképessége a transz $(CH)_x$ -el összevetve 4—5 nagyságrenddel kisebb (Shirakawa [16]).

Ito [17] DSC vizsgálatai szerint a 100—150 °C tartományban az eredetileg cisz $(CH)_x$ spektrumában széles exoterm csúcs jelenik meg, ami a transz módosulat termogrammból hiányzik. A szerzők ezt a jelet cisz-transz izomerizációval hozzák kapcsolatba. Értelmezésük szerint az észlelt exoterm csúcs egy endoterm, szerkezeti rendezetlenség kialakulásával kapcsolatos csúcs és az exoterm izomerizáció eredője.

Ito [18] és társai a $(CH)_x$ kristályszerkezetét (318. old.) és sűrűségét vizsgálták a transz tartalom függvényében. Eredményeik szerint a cisz $(CH)_x$ termikus, szilárd fázisú izomerizációja folyamán a poliacetilén cisz és transz kettős kötést tartalmazó szegmensekből álló kopolimer. A termikus izomerizáció során a $(CH)_x$ sűrűsége 50—50% cisz-transz tartalom esetén a legkisebb, így ennél a cisz-transz aránynál a legnagyobb a szerkezeti rendezetlenség. Megemlítjük, hogy a C—C, illetve a hidrogén atomok közti távolságok a cisz, illetve a transz izomer esetén különbözőek. A magtávolságok változása és ezen keresztül az izomerizáció így 1H illetve ^{13}C NMR spektroszkópia alkalmazása nyomon követhető: Mihály [19], Bernier [20].

Ito [17] és *mu* katársai az izomerizáció kinetikáját is vizsgálták. Eredményeik szerint az izomerizációs reakció nem jellemezhető egyszerű reakciórenddel. A kinetikai görbék kezdeti meredekségét felhasználva kiszámolták a reakció kezdeti sebességét különböző hőmérsékleteken. Eredményeiket Arrhenius-féle összefüggésben ábrázolták és kiszámították az aktiválási energiát. A cisz poliacetilén izomerizációjának a reakció kezdeti sebességéből meghatározott aktiválási energiája 71,2 kJoule/mol. (Az Arrhenius ábrázolásra a későbbiekben (331. old.) saját eredményeinkkel kapcsolatban még visszatérünk.) Az aktiválási energia növekvő transz tartalommal nő, 40—60% transz tartalom között nem változik lényegesen, majd ennél nagyobb transz koncentrációknál ismét növekszik. Ezt úgy értelmezik, hogy a szerkezeti rendezetlenség 50% transz tartalom esetén maximális. A további izomerizáció során a polimer újra kristályosodik.

Ismeretes, hogy cisz-transz izomerizáció folyamán az eredetileg diamágneses cisz izomer paramágnessé válik (Shirakawa [16], Chien [21], Bernier [22], Goldberg [23]). A paramágnességet — általánosan elfogadott nézet szerint — polienil gyökök, azaz a konjugációban képződő kötésalternálási hibák (paramágneses π -fáziskönyök) okozzák. A polienil gyökök ESR spektrumáról írt fejezetben megmutatjuk, hogy a paramágnesség transz izomer módosulatú polienil gyökökkel hozható kapcsolatba.

A poliacetilén termikusan indukált izomerizációjakor növekvő transz tartalom mellett a spin szuszceptibilitás nő, az ESR vonalszélesség pedig csökken. (Shirakawa [16], Chien [21]). Egy izomerizációs lépés esetén atomcsoportok szén-szén kettős kötések körüli elfordulása nagy energiát igényelne. Ha a kettős kötések felszakadnak és párosítatlan spinek képződnek, ez az energia lényegesen csökken. A párosítatlan spinek képződése cisz-transz izomerizációs lépéssel hozható kapcsolatba. Az izomerizáció során növekvő spin szuszceptibilitás ennélfogva a transz szegmensek számának növekedését jelzi, a csökkenő ESR vonalszélesség viszont a transz polienil gyökök hosszának növekedésére utal (310. old.). Ezek alapján megállapíthatjuk, hogy az ESR spektrum segítségével számos fontos információt nyerhetünk a $(CH)_x$ cisz-transz izomerizációjára vonatkozóan. ESR vizsgálataink egy része ehhez a tárgykörhöz kapcsolódik.

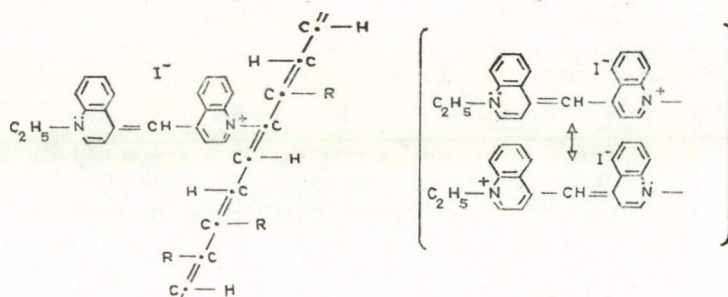
A poliacetilén izomerizációját nyújtással (*Shirakawa* [24]) és a későbbiekben bemutatásra kerülő vizsgálataink szerint hengerléssel is előidézhetjük.

Megjegyezzük, hogy az izomerizáció folyamán a $(CH)_x$ -ben degradációs folyamatok (keresztlinkés képződés, láncszakadás) is lejátszódhatnak (*Lefrant* [25]). Ezek a $(CH)_x$ fizikai (pl. elektromos) paramétereinek „romlását” okozzák.

2.4. Vezető polimerek

Elektromos vezetők és félvezetők gyanánt az 1970-es évekig szinte kizárólag elemi fémeket, ezek ötvözeit és elemi, szervesetlen félvezetőket használtak. A polimerek — elsősorban polién vázú makromolekulák — elektromos tulajdonságai iránti érdeklődés *Little* [26] „Szerves szupravezető előállításának lehetősége” című cikkének megjelenése után élnékült meg. *Little* szerint szupravezetést eredményező elektronpárok nemcsak fononok, hanem excitonok által közvetített vonzó elektron-elektron kölcsönhatás következtében is létrejöhetnek, igen magas — néhány száz K — átmeneti hőmérsékleten. Ilyen szupravezető lehet például a 2.8. ábrán bemutatott, könnyen polarizálható oldalcsoportokkal szubsztituált, polién vázú makromolekula.

A szupravezető makromolekula polién lánc mentén mozgó elektron egy R oldalcsoport közelébe érve azt polarizálja, a közeli N atom pozitív töltésű lesz. A pozitív töltésű N atom vonzó kölcsönhatást gyakorolhat egy másik elektronra. A kölcsönhatást közvetítő polarizált oldalcsoport kötött elektron-lyuk párt, excitont tartalmaz. Bár a *Little* által leírt tulajdonságokkal rendelkező szupravezetőt mindmáig nem állították elő, a konjugált kettős kötések tartalmazó láncmolekulák az érdeklődés középpontjába kerültek.



2.8. ábra. Szupravezető makromolekula (*Little*). Az R oldalcsoportok könnyen polarizálható festékmolekulák. A pozitív töltésű N atom két lehetséges helyzetét az ábra jobb oldalán mutatjuk be

A modell szupravezető makromolekula elektromos vezetőképessége erősen anizotrop, mivel a láncokra merőlegesen az elektrontranszport valószínűsége nagyon csekély. Az olyan anyagokat, amelyek elektromos vezetőképessége erősen anizotrop, kvázi egydimenziós (kvázi 1 D) rendszereknek nevezik. A vezetőképesség anizotrópiája, azaz a jól vezető, illetve a rosszul vezető irányokban mért vezetőképességek hányadosa esetenként 10^5 is lehet. Kvázi 1 D rendszerek szerves komplexek — első-

sorban kristályos töltésátviteli sók —, kevert valenciájú átmenetifém komplexek (Keller [27]) és polimerek (Goodings [28]) között találhatók.

A kávi 1 D anyagok vizsgálata a szilárdtestfizika egyik nagyon fontos területe. Ennek egyik oka a jól vezető fémek nagyságrendjébe eső vezetőképességű, esetleg szupravezető kvázi 1 D rendszerek előállításának a lehetősége. A kutatások fontos eredménye az első szerves, kvázi 1 D, szupravezető anyag, a $(\text{TMTSF})_2 \text{PF}_6$ (tetrametil-tetraszelén fulvalén foszfor-hexafluorid) töltésátviteli komplex. A szupravezető fázisátalakulás hőmérséklete 12 kbar nyomáson 0,9 K (Bechgaard [29]).

A vezető polimerek vizsgálatának célja jelenleg nagy elektromos vezetőképességű polimerek előállítása, továbbá az elektromos vezetés mechanizmusának tanulmányozása. A kutatások alapvető feladata a kémiai szerkezet és az elektromos tulajdonságok közötti kapcsolat feltárása. Ennek ismeretében az elektronikai ipar számára kívánt tulajdonságú anyagokat lehetne előállítani.

Egy anyag elektromos vezetőképessége (σ) a töltéshordozók koncentrációjától (n), mobilitásától (μ) és a töltésétől (e) függ: $\sigma = n\mu e$. Jól vezető anyag kialakulásának eszerint az a feltétele, hogy nagy töltéshordozó koncentrációval rendelkezék, a Fermi nívó pedig nem tiltott sávba, hanem a töltéshordozók energiasávjába essen. Egy molekula nem kötő, vagy lazán kötött π elektronjaiból könnyen képződhetnek töltéshordozók. Amennyiben ezek egy konjugált kettős kötéseket tartalmazó rendszerben delokalizálódhatnak, nagy lesz a mobilitásuk. A szerves vezetők egyik csoportja ilyen delokalizált π -elektronokat tartalmazó polién vázú, konjugált láncú polimerekből áll. Viszonylag jól vezető polimerek azonban nemcsak konjugált kettős kötéseket tartalmazó láncsal rendelkező, hanem ettől eltérő szerkezetű makromolekulák is lehetnek. Ezek ismertetése helyett — mivel erre a disszertáció keretein belül nincs lehetőség — irodalmi összefoglalókra utalunk: Seanor [30], Blythe [31], Goodings [28]. A szerves vezetők másik fontos csoportját az említett kvázi 1 D töltésátviteli sók alkotják, amelyekben a π -elektronok intermolekuláris pálya mentén rendelkeznek nagy mobilitással. Ebbe a csoportba tartozik a szupravezető $(\text{TMTSF})_2 \text{PF}_6$ is.

A kísérleti munkánk során vizsgált poliacetilén elektromos tulajdonságaival a következő fejezetben foglalkozunk.

2.4.1. Elektromos vezetés poliacetilénben

Mint említettük, a szennyezetlen poliacetilén 1,4 eV tiltott sávval rendelkező elektromos szigetelő (Fincher [12]). Vezetőképessége különböző szennyezők hatására 11 nagyságrenddel növekedhet. Kis szennyező koncentráció esetén fizikai tulajdonságai hagyományos félvezetőkhez (termikusan aktivált elektromos vezetés), 2–3 atomszázaléknál nagyobb szennyezés koncentrációnál pedig a fémekhez hasonlóak. A szennyező elektronakceptor (jódb, bróm AsF (Chiang [32], [33]) és elektrondonor (K, Na, Li (Chiang [33])) egyaránt lehet.

A félvezetők leírására alkalmazott, szokásos elnevezéseket használva az elektronakceptorok „p-típusú” lyuk, a donorok „n típusú” elektron szennyezést okoznak a poliacetilén mátrixban. A „p” és az „n” típusú szennyezéseket a koncentrációk változtatásával kompenzálni lehet. A szennyezett poliacetilént ezen tulajdonsága hagyományos félvezetőként történő alkalmazásra felhasználhatóvá teszi (Chiang [33]).

Ebben a fejezetben szeretnénk bemutatni azt a három legfontosabb modellt, amelyek alapján a különböző szerzők a szennyezett poliacetilén elektromos tulaj-

donságait értelmezik. Annak ellenére ugyanis, hogy a szennyező koncentráció függvényében a $(CH)_x$ számos fizikai tulajdonságát vizsgálták, a szigetelő-fém átmenet, a vezetési mechanizmus és számos egyéb tulajdonság magyarázatára vonatkozóan az irodalomban nincs egységesen elfogadott elképzelés.

Chiang [32] és munkatársai szerint kis szennyező koncentrációknál a $(CH)_x$ tiltott sávjában lokalizált szennyezési nívók vannak. A szennyezés a polimerben nagyjából homogén eloszlású. Növekvő koncentrációjú szennyezés (a félvezetők irodalmában szokásos elnevezés szerint dópolás) hatására az elektron energianívók a tiltott sávban sűrűsödnek, és egy meghatározott koncentrációnál szigetelő-fém Mott átalakulás játszódik le.

Ikehata [34] és munkatársai a poliacetilén mátrixban szintén egyenletes szennyező részecske eloszlást felételeztek. Elképzelésük szerint az elektromos vezetést kis koncentrációjú szennyezés esetén spinnel nem rendelkező, mobilis töltéshordozók, elektromosan töltött szolitonok okozzák. (Az elektromosan töltött szolitonok néhány tulajdonságáról a 2.1. fejezetben szóltunk.) Az elektromosan töltött szolitonok képződéséhez szükséges energia kisebb, mint a a sávszerkezet alapján várható gerjesztési energia. Értéke összhangban van a vezetőképesség mért aktiválási energiájával (S_u , [6]).

Tomkiewitz [35] és munkatársai szerint a szennyezés eloszlása a $(CH)_x$ -ben inhomogén. Értelmezésük szerint a poliacetilénben jól vezető, fémes részek és szigetelő, szennyezéseket nem tartalmazó tartományok vannak. Elektromosan töltött szolitonok feltételezése mágneses méréseik szerint nem megalapozott, de a különböző tulajdonságok magyarázatához nem is szükséges. A polimer akkor fémes, ha elegendően nagy szennyező koncentrációnál a fémes tartományok összeérnek.

Az említett modellek közötti legfontosabb különbség a szennyezés feltételezett eloszlásának különbségéből fakad. *Jánossy* [35] és munkatársai energiadiszipperzív röntgen analízis segítségével megmutatták, hogy a kis koncentrációjú jó szennyezés a polimer film keresztmetszete mentén inhomogén módon oszlik el (100 μm -es skála). A szennyezők eloszlása a polimert alkotó kristályos fibrillákon (318. old.) belül is feltehetőleg inhomogén (10 nm-es skála). A szennyező részecskék először a $(CH)_x$ kristályos szálak felületéhez kötődnek. Kis szennyező koncentráció esetén a szennyezők mennyisége nem elég a szálak (fajlagosan igen nagy) felületének beborításához. A szálak felületén ilyen esetben feltehetőleg jól vezető és szigetelő fázisok vannak jelen. Növekvő szennyezés koncentráció hatására ez a felület telítődik. A szálak szerkezetén belül az említett két fázis jelenlétére közvetett kísérleti eredmények is utalnak. Dópolás hatására ugyanis a $(CH)_x$ infravörös spektrumában a szennyezett anyagra jellemző új csúcsok jelennek meg, a tiszta anyagra jellemző sávok helye viszont változatlan marad.

2.5. A PVC degradációja

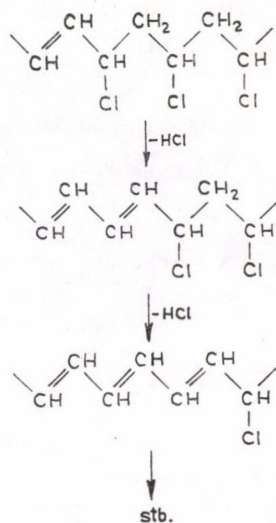
A műanyagként felhasználható polimerek fiziko- mechanikai és kémiai tulajdonságainak számos követelményt kell kielégíteniük. Ez az oka annak, hogy — bár viszonylag nagy azon monomerek száma, amelyek polimerizációs reakciókban makromolekulákat képezhetnek — mégis az iparban nagy mennyiségben gyártott polimer fajták száma viszonylag csekély. A polimerek tulajdonságai az előállítási körülményektől, így például a polimerizációs hőfoktól, az alkalmazott nyomástól, a katalizátor és oldószer anyagi minőségétől és számos paramétertől erősen függenek. Ennek megfelelően az iparban sokféle polimerizációs eljárást alkalmaznak. (Ezek összefoglalása pl. *Elias* [36] könyvében megtalálható.)

A műanyagok tulajdonságai a feldolgozás és a felhasználás során különböző behatások (pl. hő, oxigén, fény és egyéb elektromágneses sugárzások) következtében megváltoznak. Az ilyen — a polimerek tulajdonságainak romlásával járó — folyamatot nevezzük a polimerek degradációjának. A legnagyobb mennyiségben gyártott műanyagok a poliolefinok, a polivinil-klorid (PVC) és a polisztirol (PS) esetén a lényeges degradációs folyamatok alapvetően különböznek. A PVC láncmolekulákról már viszonylag alacsony hőmérsékleten (100 °C felett) hidrogénklorid (sósav) molekulák hasadnak le. A poliolefinok és a polisztirol inert atmoszférában, hasonló hőmérsékleten gyakorlatilag nem károsodnak.

A műanyagok degradációjának és a degradáció elleni stabilizálásuknak, mint alapvető fontosságú ipari problémának, igen kiterjedt irodalma van. Ezek közül megemlíthjük *Jellinek* [37] összefoglaló könyvét, a „Polymer Degradation and Stability” című folyóiratot, valamint a „Degradation and Stabilization of Polymers” (Applied Science kiadó, London) könyvsorozat köteteit, mint olyan forrásmunkákat, melyekben különböző, a témakörbe vágó kérdések átfogó elemzése és kiterjedt irodalomjegyzékek találhatók. A továbbiakban a PVC-vel, közelebbről a degradációjának néhány kérdésével foglalkozunk.

Hazánkban a PVC a legnagyobb mennyiségben előállított műanyag. Vinil-kloridból ($H_2C=CHCl$) állítják elő, gyökös polimerizáció útján. Számos jó tulajdonsága mellett jelentős hátránya, hogy termikus stabilitása kicsi. A feldolgozás hőmérsékletén már számottevő sebességgel degradálódik. A dolgozatban termikus úton, inert atmoszférában degradált PVC-ben képződő poliének néhány tulajdonságát vizsgáltuk. A PVC-nek az oxigén, elektromágneses sugárzások, illetve egyéb folyamatok által kiváltott degradációjára, továbbá a polimer degradáció elleni, különböző adalékanyagokkal történő stabilizálására nem térünk ki. Ehelyett a tárgykörre vonatkozó irodalomra utalunk: *Ranby* [38], *Nass* [39], *Tüdös* [40], *Scott* [41].

A PVC termikus degradációja során elsődleges és másodlagos folyamatokat különböztetünk meg (*Tüdös* [42]). Az elsődleges folyamatokban a PVC láncról már 150 °C-on, mérhető sebességgel hidrogénklorid molekulák hasadnak le. Eközben a makromolekula polimerizációs foka változatlan marad, a lehasadt hidrogénklorid molekulák helyén pedig polién szekvenciák maradnak vissza. A polimer láncról egy HCl molekula eliminációja után az azzal szomszédos HCl lehasadása kedvezményezett. A hőbomlási folyamat „allilaktívált” úgynevezett zippzár jellegű „láncreakció”. A képződő polién szegmensek különböző láncletörési reakciók útján záródhatnak. Az alábbi ábrán a termikus degradáció (dehidroklórozódás) elsődleges folyamatát mutatjuk be:



2.9. ábra. A hidrogénklorid elimináció vázlatos képe a PVC degradációjában. A (*)-al jelölt klóratomok kötő elektronjai a kettős szén-szén kötéshez viszonyított allil helyzet miatt delokalizálódhatnak. Az ilyen klóratomoknak a PVC láncsal való kémiai kötése labilis lesz, és a következő degradációs lépésben nagy valószínűséggel lehasadnak.

Az irodalomban a degradációs folyamat mechanizmusára vonatkozó nézetek eltérőek. A HCl elimináció értelmezésére ionos (Geddes [43]), gyökös (Gupta [44]) és molekuláris (Braun [45]) reakciólépéseket is feltételeztek. Számos, a mechanizmussal összefüggő fontos egyéb kérdés (pl. a kinetikai lánc záródásának problémája) szintén nyitott.

A dolgozatban a degradáció elsődleges folyamatainak során keletkezett poliének paramágneses és optikai tulajdonságaira vonatkozó eredményeinket mutatjuk be. A poliének vizsgálatának fontosságát az alábbiakban vázolt, a degradáció másodlagos folyamatai során végbemenő kémiai reakcióik, és a PVC tulajdonságaira gyakorolt befolyásuk indokolják (Kelen [46]).

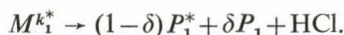
A poliének kémiai reakciói

- a degradált PVC-ben keresztkötések, így gél kialakulását eredményezik, ami lényegesen rontja a polimer feldolgozhatóságát (Kelen [46], Kelen [47]),
- felelősek a degradáció során az aromás bomlástermékek képződéséért (Kelen [48], Chang [49]),
- fontos szerepet töltenek be oxidatív folyamatokban (Tüdős [40]), továbbá
- a lehasadt hidrogénkloridnak a degradációra kifejtett katalitikus hatásában (Nagy [50]), a polimer stabilizálásában (Scott [41]), meghatározzák a polimer színét stb.

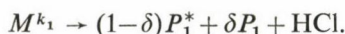
Tüdős [51] a hidrogénklorid lehasadásra és a polién képződésre kapott mérési eredmények alapján kinetikai modellt állított fel. Mivel a dolgozatban a modell eredményeit felhasználjuk, a HCl lehasadás kinetikai tárgyalását az alábbiakban röviden ismertetjük.

A modell keretein belül az ún. lánczáródás egy δ valószínűségi paraméterrel jellemezhető. Eszerint egy monomeregységről (M) történő hidrogénklorid lehasadás következtében (δ valószínűséggel) az inaktív végtermék (P) ($1-\delta$) valószínűséggel pedig aktiváló hatást kifejtő kettős kötés (P^*) keletkezik. A hidrogénklorid lehasadás

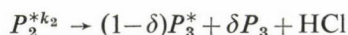
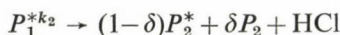
iniciálása hibahelyeken, illetve véletlenszerűen történhet meg. (Eszerint a hibahelyek elfogyása után az iniciálás véletlenszerű.) A megfelelő kinetikai egyenletek:
Véletlenszerű iniciálás:



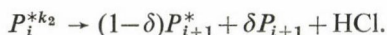
Hibahelyeknél bekövetkező iniciálás:



A láncnövekedési lépések:



⋮



A k_1^{*} , k_1 és k_2 a megfelelő folyamatok sebességi állandói. A hidrogénklorid lehasadás konverziója nyilván $\xi = [\text{HCl}]/M_0$, ahol M_0 a monomer egységek kezdeti koncentrációja. A fenti mechanizmus alapján a sebességi egyenletek felírhatók. A stacionaritás feltételét alkalmazni lehet: a láncot vivő aktív közttermékek koncentrációja független az időtől. Ezzel a feltétellel a kinetikai modell megoldható. A kapott eredmények szerint (Tüdös [51]) az n konjugációs hosszú poliének koncentrációi (P_n) geometriai eloszlást képeznek:

$$P_n = \delta^2(1-\delta)^{n-1} \quad (2.11)$$

a poliének átlagos hossza $\langle n \rangle$ pedig

$$\langle n \rangle = \frac{\sum_{n=1}^{\infty} n P_n}{\sum_{n=1}^{\infty} P_n} = \frac{1}{\delta}. \quad (2.12)$$

A különböző hosszúságú poliének koncentrációja az optikai spektrum alapján — mint láttuk — meghatározható. Így ha a polién koncentráció logaritmusát a poliénhossz függvényében ábrázoljuk, a fenti két kifejezés értelmében egyenest kapunk. Ez a mérési eredményekkel néhány % HCl konverzióig teljes összhangban van, ami a modell mechanizmus helyességét támasztja alá. Az egyenes iránytangensével az átlagos konjugációs hossz kifejezhető.

Munkánk során vizsgáltuk az $\langle n \rangle$ HCl konverziótól való függését PVC por mintán. Az ezzel kapcsolatos eredményeikről külön fejezetben számolunk be.

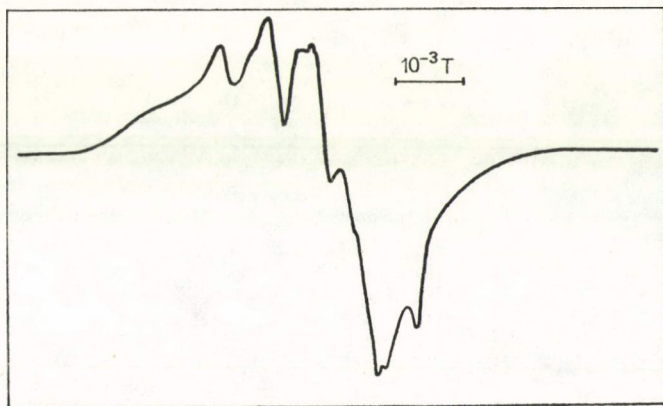
A degradáció számos fontos kérdésével, így a lánczáródás problematikájával, a fellépő ciklizációval, az ezekhez kapcsolódó kémiai folyamatok leírásával nem foglalkozunk. Ezen kérdések összefoglaló tárgyalása megtalálható Nagy [8] kandidátusi értekezésében.

2.6. Polienil gyökök ESR spektruma

A polienil gyökök elektronszerkezetéről, a paramágneses szoliton definíciójáról, kiterjedéséről korábban már szóltunk. Ebben a fejezetben különböző konjugációs hosszú polienil gyökök ESR spektrumát tárgyaljuk. (Hangsúlyozzuk, hogy a polienil gyök n konjugáció hosszának azoknak a $-\text{C}_2\text{H}_2-$ egységeknek a számát nevezzük, amelyeken a párosítatlan spin sűrűsége zérustól határozottan különbözik. (Így ha egy $n=n_l$ kiterjedésű szekvenciára delokalizált gyök $N > n_l$ hosszúságú polién láncban mozog, a konjugációs hossza nem N — mint esetleg vélni lehet — hanem n_l .)

A polienil gyököket konjugációs hosszuk által meghatározott ESR spektrumuk különbsége alapján három csoportba soroltuk be:

1. típusú gyökök, melyek ESR spektruma hiperfinom szerkezetet mutat. Konjugációs hosszuk 5-nél kisebb. A hiperfinom felhasadást a hidrogének protonjai és a hidrogénmagok helyén levő elektronspin sűrűségek Fermi kontakt kölcsönhatása eredményezi. A hiperfinom vonalak száma $n+6$, a hiperfinom csatolás durván $1/(n+1)$ -el arányosan csökken (*Ohnishi* [52]). A viszonylag nagy, 10^{-3} Tesla nagyságrendű hiperfinom felhasadás az oka annak, hogy a hiperfinom szerkezet vonalai nem olvadnak össze, egy szinglett jelet eredményezve. Ilyen típusú gyökök pl. polietilén és PVC kis dózissal történő γ -besugárzása után képződnek a polimer mátrixokban (*Ohnishi* [52], *Ohnishi* [53], *Ohnishi* [54]). A 2.10. ábrán — szemléltetés céljából — egy $1,5 \times 10^4$ rad dózisú γ -besugárzásnak alávetett PVC por ESR spektrumát mutatjuk be. A sugárforrás ^{60}Co izotóp volt, a besugárzást vákuumban, szobahőmérsékleten végeztük. Az ábrán jól látható hiperfinom szerkezet és a csatolási állandók alapján az $1,5 \times 10^4$ rad dózissal besugárzott PVC-ben legnagyobb valószínűséggel allil gyökök fordulnak elő.



2.10. ábra. PVC ESR spektruma γ -besugárzás után

Hasonló „1. típusú” gyökökre vonatkozóan az irodalomban számos közelmény található. A további tárgyalás helyett ezekre utalunk (*Ranby* [55]).

2. típusú gyökök, melyek konjugációs hossza 5-től megközelítőleg 12–14-ig terjed. ESR spektrumuk szinglett. Ennek oka, hogy az 1. típusú gyökökhöz képest

a hiperfinom felhasadás a nagyobb konjugációs hossz miatt lecsökkent, a hiperfinom vonalak egyetlen szingletté olvadnak össze. A szinglett így inhomogén módon kiszélesedett, a szélességét a fel nem bontott hiperfinom szerkezet határozza meg. Mivel a hiperfinom csatolás a konjugációs hossz függvénye, így várhatóan a szinglett ΔH_{pp} vonalszélessége és az n konjugációs hossz között is kapcsolat áll fenn. Ez a kapcsolat *Ohnisi* [52] szerint

$$\Delta H_{pp} = c \cdot n^{-1/2} \quad (2.13)$$

A „ c ” konstans értéke ismert konjugációs hosszú modell polienil gyökök ESR spektrumából határozható meg. *Ohnishi* említett munkája alapján a dolgozatban értékét $3,5 \times 10^{-3}$ 1/Tesla-nak vettük (ΔH_{pp} Tesla egységekben). A 2. típusú gyökök pl. nagy γ -dózissal besugárzott polietilénben vagy PVC-ben, átlagosan rövid transz szegmenseket tartalmazó, cisz módosulatban gazdag poli-acetilénben, illetve terminusan degradált PVC-ben fordulnak elő (*Ohnishi* [52, 53, 54], *Shirakawa* [16]).

3. típusú gyökök $n=12-14$ -nél hosszabb, transz módosulatú polién láncon. Korábban láttuk, hogy a paramágneses π -fáziskönyök energiaminimumát *Kertész* [7] szerint $n=12-14$ $(CH)_2$ egységekből álló konjugált szénláncon bekövetkező spin delokalizáció esetén éri el. Ha a polienil gyököt tartalmazó polién lánc ennél hosszabb, a polienil gyök kiterjedését és lokális spinsűrűség-closzlását megtartva a lánc mentén — mint egy lokalizált „spincsomag” — kis aktivációs energia hatására elmozdulhat. A mozgás következtében a „2. típusú” gyökök ESR szinglettjének szélességét meghatározó hiperfinom csatolás, és emiatt az ESR jel szélessége lecsökken, ún. mozgási keskenyedés lép fel (*Anderson* [56]). A transz poli-acetilén mért 7×10^{-5} Tesla szélességű ESR szinglett jelét ilyen 3. típusú polienil gyökök okozzák.

Említettük, hogy hosszú transz polienil gyök esetén a paramágneses π -fáziskönyök két oldalán a kettős kötések „ellentétesen” alternálnak. A poliének a kötés-alternálási hiba által elválasztott két — ellentétesen alternáló kötések-ből álló — oldalon az egy szerkezeti egységre jutó energia (az alternáló polién lánc degenerált állapotai) megegyezik. A spines szoliton ezért a lánc mentén mindkét irányban könnyen mozoghat. Cisz izomer esetén egy paramágneses π -fáziskönyök transz-ciszoid és cisz-transzoid szegmenseket választana el egymástól. Ezek az izomerek semmilyen szimmetria művelettel sem hozhatók egymással fedésbe, így energiatartalmuk csoportelméleti okok miatt szükségképpen különböző. Az elválasztó paramágneses π -fáziskönyök így egy ilyen lánc mentén irreverzibilisen a magasabb energiájú szegmens felé mozogna el, csökkentvén ezzel a rendszer energiáját. Az alábbi ábrán — *Yamabe* [13] munkája alapján feltéve, hogy a cisz-transzoid szerkezet energiája kisebb — egy cisz vázú polién láncon levő paramágneses π -fáziskönyök mozgását szemléltetjük.



2.11. ábra. Feltételezett paramágneses π -fáziskönyök (spines szoliton) irreverzibilis mozgása cisz vázú polién szegmens mentén

3. típusú polienil gyököket ezek alapján transz izomer módosulatú szegmenseken képzelünk el. Ezt a poli-acetilén ESR spektrumának segítségével szemléltetjük. A ciszben gazdag poli-acetilén ESR jelét 2. típusú polienil gyökök okozzák, a szinglett vonal szélessége ugyanis 10^{-3} Tesla nagyságrendű. Melegítés, azaz izomerizáció

hatására az ESR jel szélessége 5×10^{-5} Teslára is lecsökkenhet. Ez azt jelenti, hogy a lokalizált, 2. típusú gyök mozgékony, 3. típusú lesz, tehát a gyököket tartalmazó transz szegmensek hossza nő. Ennek a képnek a helyességét *Nechtschein* [57] és *munkatársai* közvetlen kísérleti bizonyítékokkal támasztották alá. A rövid polienil gyököket tartalmazó, cisz módosulatban gazdag poliacetilén DNP (Dynamic Nuclear Polarization) kettős mágneses rezonancia spektrumában ugyanis „álló” spinekre jellemző, „solid state” effektust találtak. A nagy konjugációs hosszú gyököket tartalmazó transz poliacetilén spektrumában viszont gyors spin diffúzióra jellemző Overhauser effektus lépett fel. A mozgás körfrekvenciája $\omega_e = 5 \times 10^{10}$ rad/sec. (A kettős mágneses rezonancia mérések elvi alapjait *Abragam* [58] részletesen tárgyalja.) Megjegyezzük, hogy a 3. típusú, mozgékony spinek dinamikáját különböző szennyezések érzékenyen befolyásolják. Erről bővebben a poliacetilén ESR spektrumáról írott fejezetben szólunk.

2.6.1. Az ESR spektrum alapján történő konjugációs hossz becslés pontossága

Mint láttuk, a „2. típusú” polienil gyököknél a konjugációs hossz a

$$\Delta H_{pp} = c \cdot n^{-1/2} \quad (2.13)$$

formulát használva megbecsülhető (*Ohnishi* [52]). Ebben a részben a (2.13) becslés hibáira, alkalmazhatóságának korlátaira vonatkozóan néhány megjegyzést teszünk.

Az általunk vizsgált polimerekben, azaz a poliacetilénben és a degradált PVC-ben a paramágnesességet különböző hosszúságú polienil gyökök okozzák. A hosszúság szerinti eloszlásfüggvényt $q(n)$ -nel jelölve definiálhatunk egy \bar{n}_i átlagos konjugációs hosszat (számátlag):

$$\bar{n}_i = \frac{\sum_{n=1}^{\infty} q(n)n}{\sum_{n=1}^{\infty} q(n)}. \quad (2.14)$$

Egy „2. típusú” polienil gyökökből álló rendszer ESR jele a különböző hosszúságú gyökökhöz tartozó jelek összege. A mért burkoló spektrum jelszélességéből származtatható \bar{n} konjugációs hossz valamilyen átlagérték. A $q(n)$ eloszlásból és az ESR jelből kapott átlagok azonban nem feltétlenül egyeznek meg. Másszóval az eredő ESR jel szélességéből nem az \bar{n}_i számátlag, hanem valamilyen súlyozott átlagérték számítható. Ennek a problémának a tisztázása céljából számítógép segítségével egy különböző hosszúságú polienil gyököket tartalmazó mátrix ESR spektrumát modelleztük. A spektrumot alkotó összetevő (inhomogén módon kiszélesedett) jeleket Gauss görbékkel írtuk le. A derivált jel így

$$G'(H) = y'_m \left(\frac{H - H_0}{\frac{1}{2} \Delta H_{pp}} \right) \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\left(\frac{H - H_0}{\frac{1}{2} \Delta H_{pp}} \right)^2 - 1 \right] \right\}, \quad (2.15)$$

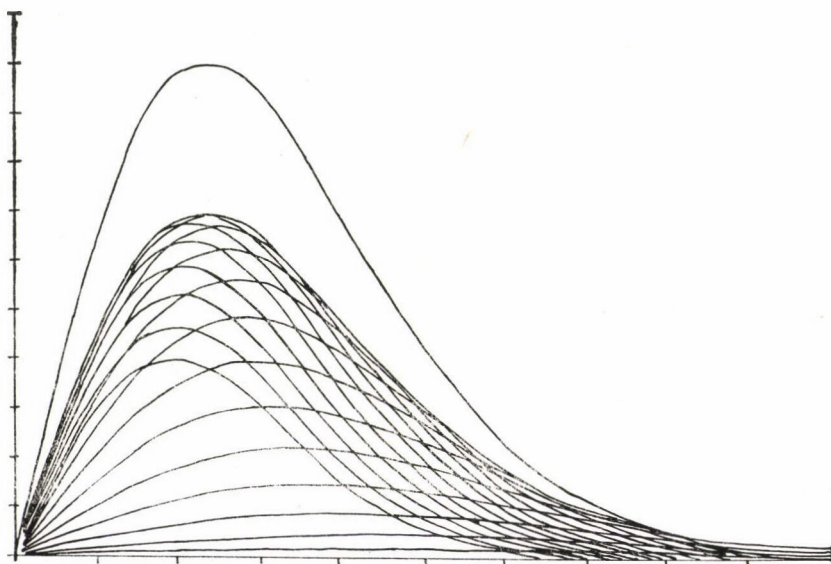
ahol H a sztatikus mágneses tér erőssége, H_0 a Gauss görbék centruma (a jel helye a spektrumban), ΔH_{pp} a jelszélesség, y'_m pedig a derivált jel amplitúdója. Az y'_m amplitúdót az egyes gyökök $q(n)$ eloszlásfüggvénynek megfelelő koncentrációjával, a jelszélességet a (2.13) formula felhasználásával vettük figyelembe. A különböző

hosszúságú gyökök koncentrációit meghatározó $\varrho(n)$ eloszlásfüggvény gyanánt (n_1, n_2) intervallumon definiált normális, illetve binomiális eloszlást alkalmaztuk. Az n_1 és n_2 levágási határok változtatható paraméterek voltak. A kapott összetevő jeleket összeadtuk. A mérhető burkoló jelszélességéből, illetve az eloszlás alapján számított átlagértékeket összehasonlítottuk. Az összes számítás

$$\bar{n}_i < \bar{n} \quad (2.16)$$

eredményt adott. Ez azt jelenti, hogy a mért eredő ESR jelből számolt átlagos konjugációs hosszak meghaladják a valódi átlagértékeket (számátlag). Az eltérés 30%-os is lehet az alkalmazott paraméterektől függően. (Az n érték nem haladta meg az $\bar{n}=10$ -et, mivel a számolások 2. típusú gyökökből álló rendszerre vonatkoznak.)

A 2.12. ábrán egy — a fentiekben leírt — számolásnak a számítógép (HP 9830 A) által kirajzolt eredményét mutatjuk be. Az összetevő vonalakat tízszeresre nagyítottuk, a derivált jel egyik felét ábráztuk, a $\varrho(n)$ függvény binomiális eloszlás volt.



2.12. ábra. Polienil gyököket tartalmazó paramágneses mátrix modellezett ESR spektruma és a burkoló összetevői

A (2.13.) becslés nemcsak a (2.16.) miatt adhat a valóságtól eltérő átlagos konjugációs hosszakat. Az (2.13.) alapján történő konjugációs hossz számolásnál a „c” konstans négyzetesen szerepel, így meghatározásának pontossága igen lényeges. Az irodalomban azonban „c” értéket csupán *Ohnishi* [52] határozta meg (ezt az értéket használjuk a dolgozatban), eredményének hibája nem ismert. A (2.13.) nagy konjugációs hosszak esetén („3” típusú polienil gyökök) nyilván nem használható. Az ebben az esetben fellépő mozgási keskenyedés ugyanis a jelszélességet lényegesen befolyásolja. Például (2.13.)-ből $\Delta H_{pp} = 7 \times 10^{-5}$ Tesla (transz (CH) $_x$ jelszélessége, 329. old.) esetén $n=2500$ adódik. Átlagosan 5000 szénatomból álló, hibátlanul kon-

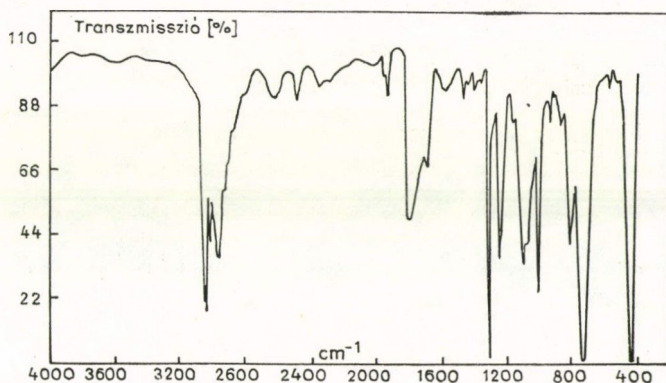
jugált polién szegmenseket tartalmazó mátrix feltételezése viszont egyáltalán nem valószínűsíthető. Megjegyezzük, hogy általában minél keskenyebb az ESR jel — azaz nagyobb a konjugációs hossz — annál nagyobb a (2.13.)-ből kapott átlagérték bizonytalansága.

Az elmondottak alapján a (2.13.)-ből kapott átlagos konjugációs hosszak számértékeit a legnagyobb óvatossággal kell kezelni. Ilyen számértékeket a degradált PVC ESR spektrumának a hidrogénklorid konverzió függvényében történő vizsgálatakor használtunk. A konjugációs hosszakra kapott számértékek elsősorban az átlagos polienil gyökkhossz változásának tendenciáját tükrözik.

2.7. A vizsgált polimerek infravörös spektruma

A polimerek infravörös (IR) spektruma elősegíti a kémiai szerkezet azonosítását, és a makromolekuláris rendszerek fizikai szerkezetére vonatkozó lényeges információkat is tartalmaz (Zbinden [59]). Az infravörös spektrum alapján többek között ismereteket szerezhetünk a polimerek kristályos szerkezetéről, optikai anizotrópiájáról, a makromolekulák konfigurációjáról, konformációjáról (az izomeriáról, illetve a takticitásról), a láncmolekulák orientációjáról stb.

Munkánk során számos alkalommal használtuk a vizsgált polimerek IR spektrumát. Így pl. a poliacetilénben a *cis*-*transz* arányt az infravörös spektrum alapján határoztuk meg. Azt is vizsgáltuk, hogy hogyan változik a PVC spektruma a degradáció során. Ezek alapján indokolt, hogy a dolgozatban bemutatunk néhány, a vizsgált rendszerekre jellemző spektrumot.



2.13. ábra. 30—70 % *cis*-*transz* összetételű poliacetilén film infravörös spektruma

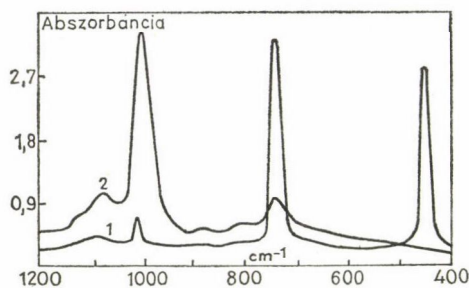
A 2.13. ábrán egy 30—70 % *cis*-*transz* összetételű poliacetilén infravörös spektrumát ábrázoltuk. A *cis*-*transz* kopolimer $(CH)_x$ spektrumának lényeges csúcsait Shirakawa [14] munkája alapján azonosítottuk.

A megfelelő IR aktív rezgések frekvenciái a *cis*, illetve a *transz* izomerek esetén eltérnek. Ennek a két izomer módosulatban fellépő, eltérő erősségű konjugáció az oka.

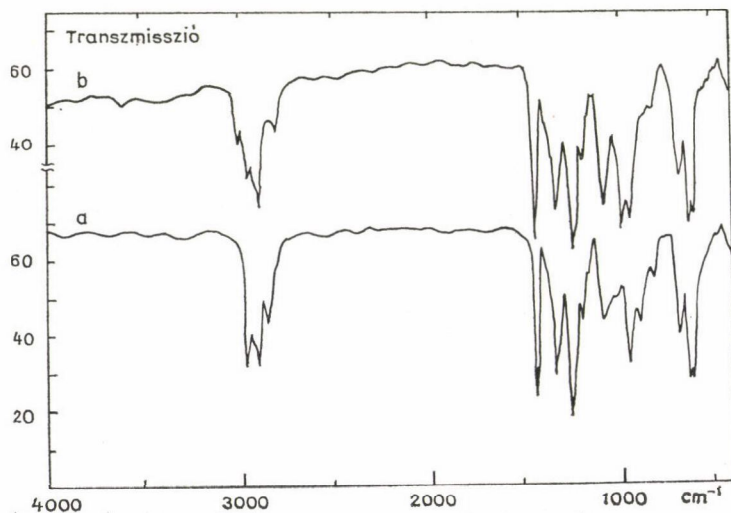
A poliacetilén infravörös spektrumát alkotó lényeges sávok azonosítása

3057 cm^{-1} , 3044 cm^{-1}	CH vegyértékrezgés (cisz)
3013 cm^{-1}	CH vegyértékrezgés (transz)
1800 cm^{-1}	1329 + 446 (cm^{-1}) felhang (cisz)
1329 cm^{-1} , 1250 cm^{-1}	CH síkban deformációs rezgés (cisz)
1118 cm^{-1}	C—C deformációs rezgés (cisz)
1015 cm^{-1}	CH síkra merőleges deformációs rezgés (transz)
740 cm^{-1}	CH síkra merőleges deformációs rezgés (cisz)
446 cm^{-1}	C—C—C deformáció (cisz)

A 2.14. ábrán a poliacetilén abszorpciós infravörös spektrumának azt a tartományát mutatjuk be, amelyben az összetétel meghatározásához használt sávok (740, illetve 1015 cm^{-1} -nél) találhatóak. Az 1-el jelzett spektrum alapján a vizsgált polimer transz tartalma 9%. A mintát 150 °C-on, 10 percig hőkezeltük. A hőkezelés



2.14. ábra. A poliacetilén abszorpciós infravörös spektruma az 1200—400 cm^{-1} tartományban. [(1)—9% transz, 91% cisz, (2)—83% transz, 17% cisz]



2.15. ábra. PVC film infravörös spektruma (a) termikus degradáció előtt, (b) termikus degradációt követően (a lehasadt hidrogénklorid mennyisége kb. 15%)

folyamán lejátszódó cisz-transz izomerizáció következtében a transz tartalom 83 %-ra növekedett (2-es spektrum). (A transz tartalmat a 301. oldalon idézett összefüggés segítségével számítottuk ki.)

A PVC infravörös spektrumát is vizsgáltuk termikus degradáció előtt és degradáció után. A 4.15. ábrán ennek megfelelően két jellemző spektrumot mutatunk be.

A bemutatott spektrumokat alkotó sávokhoz (vagy ezen sávok csoportjaihoz) tartozó kémiai kötések és atomcsoportokat — illetve ezek megfelelő deformációit — az alábbi táblázatban vázlatosan összefoglaljuk. A sávok azonosítása számos közleményben, így pl. *Schurz* [60], *Narita* [61], *Tasumi* [62] és *Shimanouchi* [63] munkáiban található meg.

A PVC infravörös spektrumát alkotó lényeges sávok azonosítása:

3000—3010 cm^{-1}	telítetlen kötéssel kapcsolódó szénatomot tartalmazó $=\text{CH}-$ vegyértékrezgés
2850—3000 cm^{-1}	tartományban $-\text{CH}-$ illetve $-\text{CH}_2-$ vegyértékrezgések
1420—1430 cm^{-1}	$-\text{CH}-$ hajlító rezgés
1350—1150 cm^{-1}	CH hajlító rezgések
1090—1100 cm^{-1}	C—C váz vegyértékrezgés
980—1015 cm^{-1}	transz polién szekvenciákhoz kapcsolódó, CH síkra merőleges deformációs rezgés
900—970 cm^{-1}	CH torziós és csavarodó rezgések
600—700 cm^{-1}	CC1 vegyértékrezgések

A PVC makromolekula kémiai szerkezete a degradáció folyamán képződő polién szekvenciák miatt módosul. Ennek megfelelően a PVC infravörös spektrumában a degradációt követően bizonyos sávok relatív intenzitása változik és új sávok jelennek meg. A spektrumban tapasztalható intenzitás változásokkal nem foglalkozunk. Megemlítjük, hogy ezek a változások az illető sávokhoz tartozó kémiai kötések és atomcsoportok relatív koncentrációinak megváltozásával kapcsolatosak.

A degradált PVC infravörös spektrumában két — viszonylag intenzív — új sáv jelent meg. A 3020 cm^{-1} -nél levő új csúcsot telítetlen π -kötéssel kapcsolódó szénatomot ($=\text{C}-$) tartalmazó CH vegyértékrezgés okozza. Az 1006 cm^{-1} -nél megjelenő intenzív sávot transz módosulatú poliének CH síkra merőleges deformációs rezgése okozza. Cisz módosulatú poliének esetén — mint a poliacetilén infravörös spektrumánál megmutattuk — ez a rezgés 740 cm^{-1} körül jelentkezik. Ebben a tartományban a PVC vizsgált spektrumaiban a degradáció nem okozott lényeges változást. Az infravörös spektrum alapján ezek szerint a PVC degradációja során a polimer mátrixban transz izomer módosulatú polién szekvenciák képződnek. Megjegyezzük, hogy *Shirakawa* [14] számításai szerint a transz poliének konjugációs hossza közvetlen kapcsolatba hozható a CH vegyértékrezgésük IR sávjának megjelenési helyével: növekvő konjugáció esetén a rezgés energiája (frekvenciája) nő.

3. KÍSÉRLETI RÉSZ

3.1. A vizsgált anyagok

3.1.1. Degradált PVC minták

A méréseket a Borsodi Vegyi Kombinát által előállított Ongrovil S 470 márka-jelű PVC mintán végeztük. Ez szuszperziós eljárással készült, amorf PVC por. A port alkotó szemcsék pásztázó elektronmikroszkópos nagyított képét a 346. oldalon mutatjuk be. A szemcseméret eloszlás éles, a szemcsék fele a 125–160 μm tartományba esik.

Az optikai mérések egy részét PVC filmekben végeztük. A filmeket 4% tetra-hidrofurános PVC oldatból készítettük. Az oldatot Petri csészékbe öntöttük. A száradás után kapott fóliákat 200 Pa vákuumban, 80 °C-on, 10–15 órán át kezeltük, ezzel az oldószert a fóliából eltávolítottuk.

A PVC mintákat szilikonolaj termosztátban, illetve ESR spektrométer fűthető mikrohullámú üregében degradáltuk. Az utóbbi eljárást a mérési módszerekről írott fejezetben ismertetjük.

A degradációt argon atmoszférában végeztük. A por és fólia mintákat olyan edényben hőkezeltük, amelybe az öblítő argon gáz előmelegítve áramlik be. A por-mintákat tálcás mintatartón, a fóliákat „U” alakúra hajlított üvegbotra ragasztva helyeztük el a degradációs edényben. Az edényből kiáramló gáz (áramlási sebessége 6–10 l/óra) szállítja a lehasadt hidrogénkloridot. A HCl—Ar gázkeveréket desztillált vizet tartalmazó vezetőképességmérő cellába vezettük. A sósav a desztillált vízben elnyelődött. Az oldat vezetőképességét Radiometer CMD konduktométerrel mértük és kompenzográffal regisztráltuk. A mérőcellák kalibrációja után a HCl konverzió egyszerűen számítható:

$$\xi_{\text{HCl}} = \Delta\sigma \frac{A}{m} \quad (3.1)$$

ahol A a kalibrációs faktor, $\Delta\sigma$ a vezetőképesség változása, m pedig a bemért PVC por tömege. A kapott degradált PVC port a különböző méréseket megelőzően a poliéneknek a levegőre való érzékenysége miatt vákuumban, illetve argon atmoszférában tároltuk.

3.1.2. A poliacetilénnek és származékainak előállítása

Az acetilén polimerizációja Ziegler—Natta katalizátor toluolos oldatának felszínén megy végbe, tiszta acetilén gáznak a reakcióedénybe történő folyamatos bevezetésekor. A polimerizáció során a katalizátor által benedvesített felületen összefüggő $(\text{CH})_x$ film réteg keletkezik (Ito [15]).

Ziegler—Natta típusú polimerizáció esetén katalizátor gyanánt a IV—VIII. oszlopba tartozó átmeneti fém valamilyen vegyületének az I—III oszlopba tartozó, főcsoportbeli fém vegyületével (hidrid, alkil, aril stb.) képezett komplexét alkalmazzák. (Tipikus példa: $\text{TiCl}_4/(\text{C}_2\text{H}_5)_3\text{Al}$.) Ilyen típusú vegyületeket katalizátor gyanánt a leggyakrabban az olefinék és a diének polimerizációja esetén használnak. Megjegyezzük, hogy a Ziegler—Natta típusú polimerizáció a makromolekuláris kémia jelenleg

is intenzíven vizsgált területe. A témáról általános összefoglalót többek között *Elias* [36] könyvében találhatunk.

Az acetilén polimerizációja során a monomer úgynevezett „beszűrös” reakció során, a katalizátor komplexszel történő sztérikus koordinációval párhuzamosan, a már meglevő $(CH)_x$ láncba cisz helyzetben épül be (sztereospecifikus polimerizáció). A láncnövekedés sémáját Yamabe [64] elképzelése alapján a 3.1. ábrán mutatjuk be. A vizsgált poliacetilén mintákat Pekker Sándor állította elő.

A polimerizáció folyamán cisz módosulatú poliacetilén képződik. A cisz izomer már szobahőmérsékleten lassan a stabilis transz módosulatba alakul át. A vizsgált transz módosulatú polimert termikus izomerizációval állítottuk elő.

Az izomerizáció során a mintákat 100 Pa-nál jobb dinamikus vákuumban, 150 °C hőmérsékletű olajfürdőben, fél óra hosszat hevítettük. Az így kapott polimer transz tartalma az infravörös mérések szerint 96–97%.

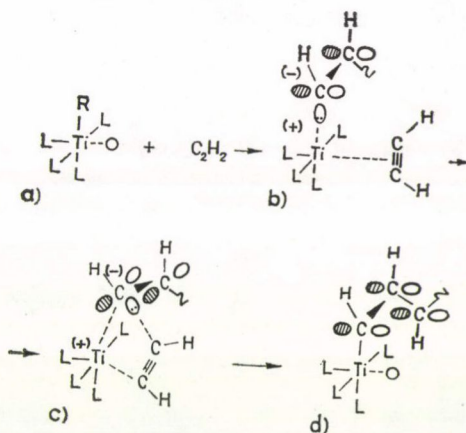
A $(CH)_x$ jóddal szennyezett poliacetilén előállításakor a $(CH)_x$ filmet tartalmazó evakuált edénybe jód gőzt vezetünk be. A beépülő jód koncentrációját in situ súlyméréssel, *Mihály György* által elkészített elrendezésben határoztuk meg. (A jód koncentráció kb. 0,01% hibával történő meghatározása az itt nem ismertetett in situ súlymérés alkalmazása miatt igen pontos.) A jód beépülése egyenáramú vezetőképesség méréseivel is nyomon követhető.

Röntgen és pásztázó elektronmikroszkópos vizsgálatok szerint a poliacetilén laza, vattaszerű, orientálatlan szálakból álló film. (A 3.2. ábrán a $(CH)_x$ -ről készült két pásztázó elektronmikroszkópos felvett mutatunk be.)

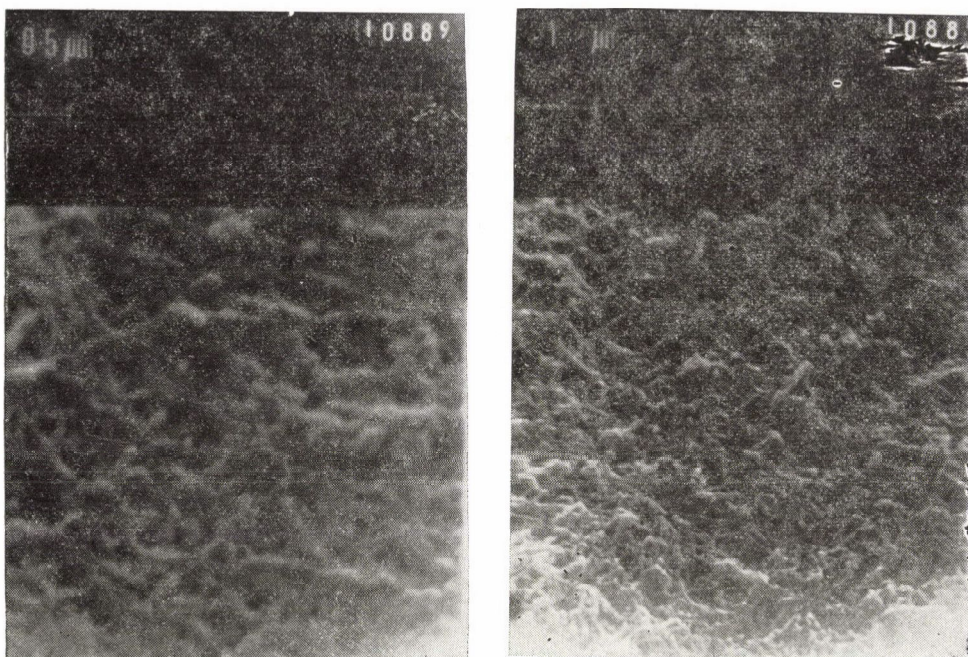
A tiszta $(CH)_x$ és jóddal szennyezett származékainak szerkezeti vizsgálatával *Hsu* [65] és *Baughman* [66] foglalkoztak. Eredményeik szerint a szálakban a poliacetilén láncok rojtozott micella jellegű kristályos fázisban vannak. A molekulák hossztengele a szálak irányával párhuzamos. A poliacetilén ortorombos rendszerben kristályosodik, $a=0,761$, $b=0,447$ (láncirány) és $c=0,439$ nm elemi cella méretekkkel.

Egy cella 8 CH egységet tartalmaz. A szerkezetből számolt sűrűség $1,16 \text{ g/cm}^3$. A mért makroszkopikus sűrűség $\rho=0,4 \text{ g/cm}^3$ körüli érték. Ennek alapján a kristályos polimer szálak a teljes térfogatnak kb. az 1/3-át töltik ki.

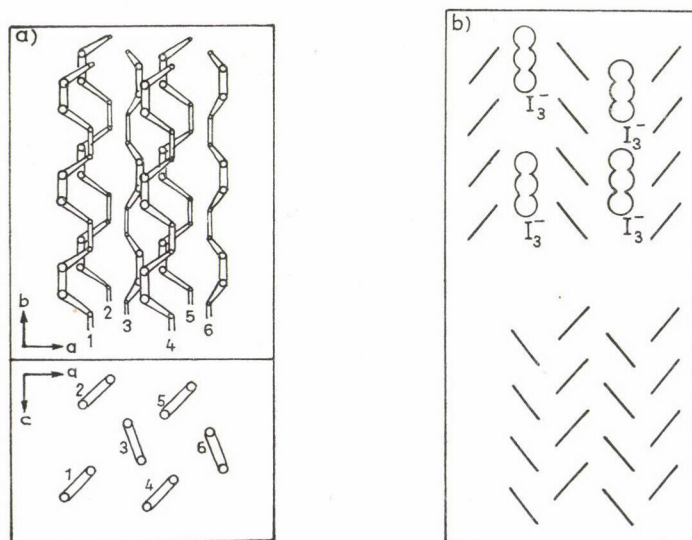
A 3.3. ábrán vázlatosan feltüntettük a cisz $(CH)_x$ láncokat, alatta pedig ezeknek az a—c síkra vett vetületét. A láncokat bemutató ábrarészletet nézve a hozzánk közelebb levő szénatomokat nagyobb, a távolabbiakat kisebb körökkel jelöltük. A perspektívát szeretnénk érzékeltetni az atomokat reprezentáló köröket összekötő vonalak is. A láncolat és vetületeiket az áttekinthetőség kedvéért megszámoztuk.



3.1. ábra. A láncnövekedés lehetséges sémája acetilén polimerizációja esetén: (a) a katalizátor komplex, „0” a szabad koordinációs helyet, „R” az előzőleg képződött acetilén láncot jelöli (b), (c) az acetilén monomer és a képződött poliacetilén szekvencia koordinációja a „beszűrös” polimerizációs reakciólépés folyamán. (d) a beépült acetilén monomer a „cisz” helyzetű „beszűrődés” után



3.2. ábra. A poliacetilén fibrillák pásztázó elektronmikroszkóppal készített képe



3.3. ábra. (a) — a czisz poliacetilén szerkezete (b) — a $(\text{CH})_x$ láncok a—c síkra eső vetülete jódózott, illetve jódot nem tartalmazó poliacetilén esetén

A vázolt szerkezetből láthatóan a $(\text{CH})_x$ kristályban a láncok úgy helyezkednek el, hogy a síkjukra merőleges π elektronpályák átfedése a szomszédos lánc ugyanilyen pályáival minimális legyen. Ez okozza egy láncsíkknak a c irányban kb. 38° -os szög alatt történő beállítást. Az a irányban igen kicsi, a b — azaz a lánc — irányába pedig a legnagyobb a pályák közti átfedés.

A 3.3. ábrán a szennyezetlen $(\text{CH})_x$ és a jóddal szennyezett $(\text{CH Iy})_x$ származék a — c síkra vett vetületét is összehasonlítottuk. A beépülő jód a kristály b — c síkjait széttolva, az a irányba a $(\text{CH})_x$ láncok közti távolságot megduplázva az eredeti mátrixba túlnyomó részben I_3^- trijodid ionok formájában interkalálódik.

A $(\text{CH})_x$ jellegzetesen fémes csillogású, lágy, könnyen vágható, oldhatatlan film. Levegőn megbarnul, könnyen oxidálódik. Idővel rideggé válik, térhálósodik. A levegővel rövid ideig érintkező anyag felületéről a barna réteg eltávolítható.

Az általunk mért $(\text{CH})_x$ és $(\text{CH Iy})_x$ mintákat kb. 0,2—0,6 mm vastagságú filmből vágtuk ki. Hengerléssel a filmet eredeti vastagságának 1/40-ed részére sikerült vékonyítani. A polimereket előállításuk után evakuált edényben, szárazjéggel hűtött aceton fürdőben tároltuk.

3.2. Vizsgálati módszerek

Munkánk során számos műszert, kísérleti berendezést használtunk. Az alábbiakban az alkalmazott legfontosabb vizsgálati módszereket, és kísérleti elrendezéseket ismertetjük.

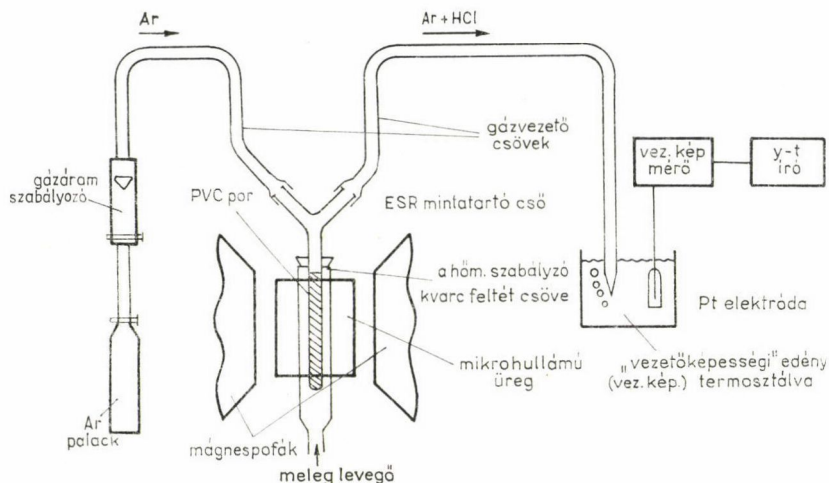
3.2.1. ESR mérések

Az X -sávú ESR spektrumokat JEOL—FE—3X, a Q -sávúakat JEOL—JES—ME spektrométereken vettük fel. Az alkalmazott kísérleti paraméterek: 100 kHz térmoduláció, a modulációs tér erőssége a spektrum legkeskenyebb szinglett jele szélességének maximum 0,3-szerese. Referencia gyanánt Mn^{++} —MgO port használtunk. Az Mn^{++} 6 vonalának segítségével a szabad elektron g -faktoránál levő jelek a spektrumban könnyen azonosíthatóak. A g -faktor méréséhez szükséges mágneses tér meghatározáshoz 10^{-6} Tesla érzékenységgű NMR Gaussmérték alkalmaztunk. Az abszolút spinsűrűségek méréséhez $3,0 \times 10^{15}$ spin/cm spinsűrűségű, Varian gyártmányú referenciát használtunk. A spinsűrűségeket a derivált jel kétszeres, numerikus, számítógépes integrálásával, saját készítésű program felhasználásával kaptuk. A spektrumokat HP—9864A digitizer segítségével „olvastuk be” a számítógép (HP—9830A) memóriájába. Az ESR spektrométerünk mikrohullámú forrása 10 μW —200 mW közötti, igen tág teljesítmény tartományban működik. Ez nagyon kedvező volt a spektrumok telítési tulajdonságainak vizsgálatánál.

A spektrométer hőmérséklet szabályzó feltétjének segítségével a vizsgált minta hőmérséklete (-150 ; $+250$) $^\circ\text{C}$ tartományban változtatható. A PVC por minták termikus degradációját az ESR spektrométer mikrohullámú üregében, in situ hajtottuk végre. A PVC degradációjához szükséges 200 $^\circ\text{C}$ hőmérsékletet az ESR spektrométer hőmérséklet szabályzó feltétje állította elő. (A hőmérséklet a néhány órás hőkezelés során ± 3 $^\circ\text{C}$ -on belül stabil volt.) A 3.4. ábrán bemutatott mérési elrendezés lehetővé tette az ESR spektrum jellemzőinek a lehasadt hidrogénklorid mennyiségének függvényében történő meghatározását. Az ESR spektrum felvételé-

vel párhuzamosan ugyanis, a PVC degradációjáról szóló részben ismertetett vezetőképesség mérés alkalmazásával meghatároztuk az aktuálisan lehasadt HCl mennyiségét.

A spektrométer hőmérséklet szabályozója melegített levegőt fúj be az ábrán feltüntetett, az üregben levő kvarc feltétbe. Ebbe a kvarc csőbe volt beledugva az „Y” formájú ESR cső, mely a vizsgálandó PVC port tartalmazta. Az „Y” egyik felső száján áramlott be a 99,99% tisztaságú argon gáz a csőbe. A másik felső száján a rendszerből kiáramló argon eltávolította a lehasadt hidrogénkloridot az ESR csőből. Ezt az $\text{Ar} + \text{HCl}$ gázkeveréket vezettük a vezetőképesség mérő edénybe. Mint korábban megmutattuk, a vezetőképesség mérés segítségével a PVC-ről lehasadt HCl mennyisége meghatározható.



3.4. ábra. A PVC degradáció ESR vizsgálata során alkalmazott mérési elrendezés

3.2.2. Az UV-látható spektrum mérése

A degradált PVC különböző hosszúságú poliénjei kromofórok. Az UV-látható (UV—VIS) spektrumuk alapján a degradációra és a degradált PVC mátrixra vonatkozó, számos fontos információ nyerhető. A vizsgált spektrumokat Zeiss (Jena) SPECORD gyártmányú spektrométeren vettük fel, a $14\text{--}30 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ tartományban. Oldatspektrumok esetén oldószer gyanánt tertahidrofuránt alkalmaztunk. A degradáció előrehaladtával a PVC-ben irreverzibilis térhálósodás és gélképződés indul meg. Ezért a degradált PVC por csak bizonyos hidrogénklorid konverzió értékig oldható. Ennél magasabb konverziók esetén a spektrum PVC fóliákon vizsgálható.

3.2.3. Az infravörös spektrumok mérése

Poliacetilén és PVC film, illetve degradált PVC por KBr-al préselt minták infravörös spektrumát vizsgáltuk. A transzmissziós spektrumokat Zeiss (Jena) IR SPECTORD, az abszorpciós, illetve néhány transzmissziós spektrumot pedig Fourier-transzformációs NICOLET FT—IR spektrométer felhasználásával vettük fel.

3.2.4. A mikrohullámú vezetőképesség és a dielektromos állandó mérése

A mikrohullámú vezetőképesség (σ_{AC}) és a dielektromos állandó (ϵ') mérésére Burarov [67] által leírt elven működő, a KFKI Szilárdtestkutató Intézetében Holczer Károly és Jánossy András által megépített berendezést használtuk. A módszerrel kontaktusok nélkül, egyidejűleg mérhető a σ_{AC} és az ϵ' . A 9,1 GHz körfrekvencián működő berendezés segítségével a mérendő anyag $\epsilon = \epsilon' + i\epsilon''$ komplex dielektromos állandóját határozhatjuk meg. Az ω körfrekvencián a $\sigma_{AC}(\omega)$ vezetőképességet az $\epsilon'' = 4\pi \cdot \sigma_{AC}(\omega)/\omega$ képzetes rész tartalmazza, $\epsilon'(\omega)$ a dielektromos állandó.

A mérés során egy nagy jósági tényezőjű üregrezonátorba bejuttatjuk a mérendő mintát. Ezzel eltoljuk az üreg rezonancia frekvenciáját és elrontjuk a jósági tényezőjét — azaz növeljük a rezonancia félértékszélességét. A minta geometriai jellemzőinek ismeretében, a rezonancia frekvencia eltolódásából és a rezonancia félértékszélesség megváltozásából a mikrohullámú vezetőképesség és a dielektromos állandó meghatározható. A mérőberendezés meglehetősen összetett, az elektronikus és mikrohullámú részeinek működését ezért itt nem ismertetjük. A műszernek és a mérés kiértékelésének leírása Holczer [68] munkájában megtalálható.

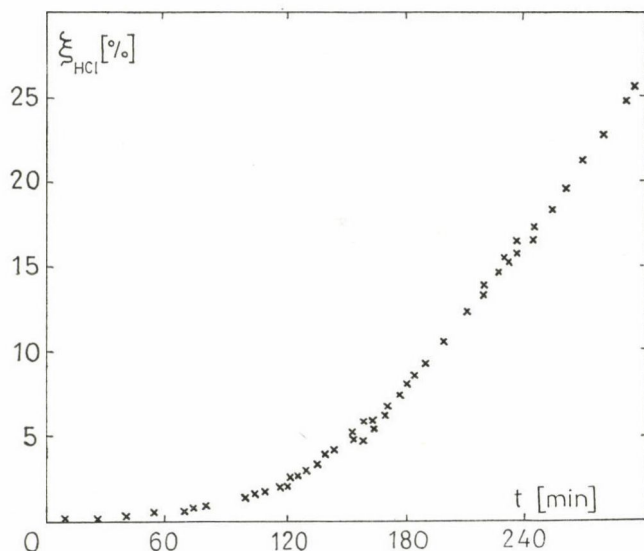
Az ebben a fejezetben nem vázolt, esetenként alkalmazott vizsgálati módszerek és kísérleti körülmények rövid ismertetésére az adott mérés eredményeinek leírásakor a továbbiakban, a megfelelő fejezetekben kerül sor.

4. A MÉRÉSI EREDMÉNYEK ÉS ÉRTELMEZÉSÜK

4.1. A termikusan degradált PVC ESR vizsgálata: rövid polienil gyökök

A PVC termikus degradációjára vonatkozó részben említettük, hogy a degradáció elsődleges folyamataiban a PVC mátrixban a lehasadt hidrogénklorid molekulák helyén poliének és polienil gyökök maradnak vissza. Ebben a fejezetben a degradáció után, a PVC mátrixban visszamaradt polienil gyökökre vonatkozó ESR vizsgálataink egy részének eredményeit ismertetjük. A termikus degradációt az ESR üregben in situ végeztük. A spektrumok felvételével párhuzamosan a lehasadt hidrogénklorid mennyiségét is mértük. Az ESR spektrum jellemzőit a hidrogénklorid lehasadás konverziója függvényében vizsgáltuk. A 4.1. ábrán egy tipikus hidrogénklorid konverzió — degradációs idő függést mutatunk be.

Az ESR üregben végzett degradáció során felvett konverzió vs. degradációs idő — $\xi_{HCl} = f(t)$ — görbéken két jellegzetes szakasz különböztethető meg. A 0—160 perc közötti degradációs idő intervallumban a HCl lehasadási sebesség nő, majd kb. a 160. perctől kezdődően a lehasadási sebesség állandó. A görbe kezdeti szakaszából

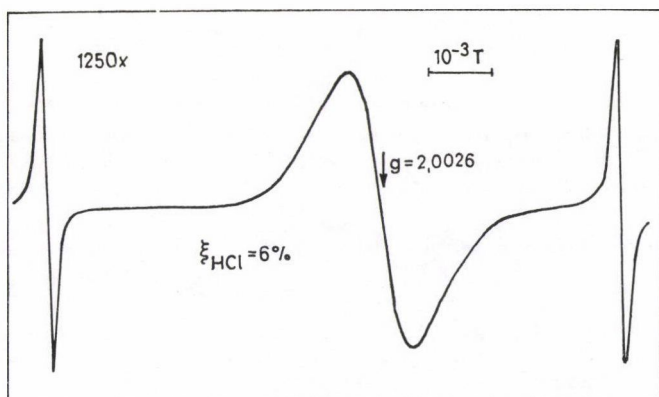


4.1. ábra. A hidrogénklorid konverzió
a degradációs idő függvényében ($T=200\text{ }^{\circ}\text{C}$)

származtatott hidrogénklorid lehasadási sebesség kisebb, mint a standard mérési körülmények (316. old., argonnal jól átöblített, kis tehetetlenségű, hagyományos, mérési elrendezés) alkalmazása esetén kapott érték. Standard körülmények között ugyanis $200\text{ }^{\circ}\text{C}$ -on 50 perc alatt 1 % HCl hasad le (Nagy [8]), míg a mi mérési elrendezésünkben csak kb. 0,5—0,6 %. Az eltérés oka feltételezésünk szerint az, hogy az „Y” alakú ESR csövet átöblítő argon a cső alsó részén levő PVC por környezetéből nem öblíti ki tökéletesen a képződő hidrogénkloridot. Ennek következtében kísérleteink során becslésünk szerint legfeljebb 0,5—1 % konverziónak megfelelő hidrogénklorid a PVC por környezetében a reakcióterben marad. Meg kell említeni, hogy a hidrogénklorid a PVC degradációjára katalizáló hatással van (Nagy [50]). Ennek a katalizáló hatásnak tulajdonítjuk a hidrogénklorid lehasadás gyorsuló kinetikáját. A hidrogénklorid katalizáló hatása azonban — mint később látjuk — a polienil gyökök általunk vizsgált jellemzőit nem befolyásolja. A hagyományos, tálcás mérési elrendezésben degradált PVC mintákon összehasonlító céllal végzett mérések ugyanis az ESR üregben degradált mintákon végzett méréseinkkel megegyező eredményeket szolgáltatottak.

Mint tudjuk, a PVC degradációja során paramágneses centrumok keletkeznek. A képződő párosítatlan spicentrumok 2,0026 g-faktornál levő szinglett ESR jelet adnak. Egy jellemző, $\xi_{\text{HCl}}=6\%$ konverziónál mért ESR spektrumot mutatunk be a 4.2. ábrán.

A degradáció folyamán képződő paramágneses centrumokat több szerző (Ohnishi [54], Hay [69]) elsősorban polienil gyökökkel azonosítja. A mi véleményünk ezekkel a szerzőkkel egyezik meg. Ugyanakkor meg kell említeni, hogy vannak más szerzők (Ouchi [70], Menczel [71]), akik a polienil gyökök jelenlétét a degradált PVC mátrixban valószínűtlennek tartják. Fő érveik szerint



4.2. ábra. Degradált PVC ESR spektruma

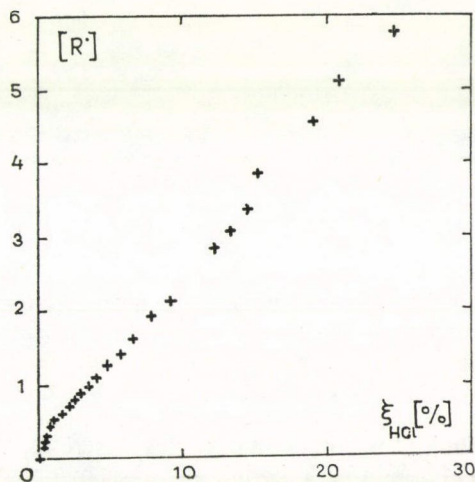
- polienil gyökök kémiaiilag nem lehetnek stabilak a magas degradációs hőmérsékleten, továbbá
- az ESR spektrum alapján meghatározható konjugációs hosszuk valószínűtlenül nagy.

Saját vizsgálataink során is tapasztalt kísérleti tény azonban, hogy a polienil gyökök a poliacetilénben 200—250 °C hőmérsékleten is stabilak (Chien [21]). A nagy stabilitást a π pályák rezonancia energiája eredményezi. A polienil gyökök ESR mérésekből megbecsülhető konjugációs hossza pedig — mint a fejezet további részében megmutatjuk — összhangban van az elméletileg várható értékekkel.

- Méréseink során a lehasadt hidrogénklorid függvényében vizsgáltuk
- a képződő párosítatlan spinű elektronok koncentrációját, és
 - a szinglett ESR jel vonalszélességét.
- A mérési eredményeket a 4.3. és 4.4. ábrákon mutatjuk be.

ESR jelet a degradáció kezdeti szakaszától kezdődően — a spektrométer érzékenységén (2×10^6 spin/Tesla) belül $\xi_{\text{HCl}} = 0,1\%$ konverziótól kezdve — detektáltunk. Hangsúlyozzuk azonban, hogy a paramágneses centrumok képződése egy esetleges gyökös degradációs mechanizmusra vonatkozóan nem bizonyított. A képződő párosítatlan spinű elektronok a dehidroklórozódási reakciónak nem közti, hanem végtermékei, és a degradált polimer mátrixra jellemzőek.

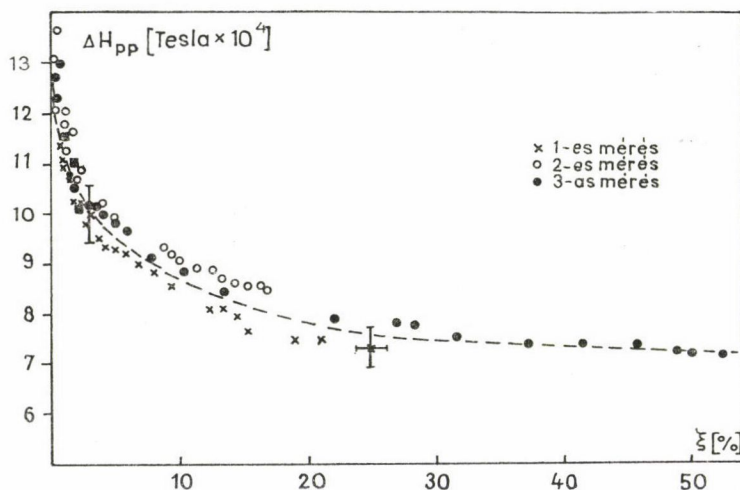
Amint azt a 4.3. ábrán egy jellemző esetben bemutatjuk, a spin koncentráció, $[R^\cdot]$, a lehasadt hidrogénklorid függvényében nő. Az ordinátán egy osz-



4.3. ábra. A spin koncentráció a hidrogénklorid konverzió függvényében

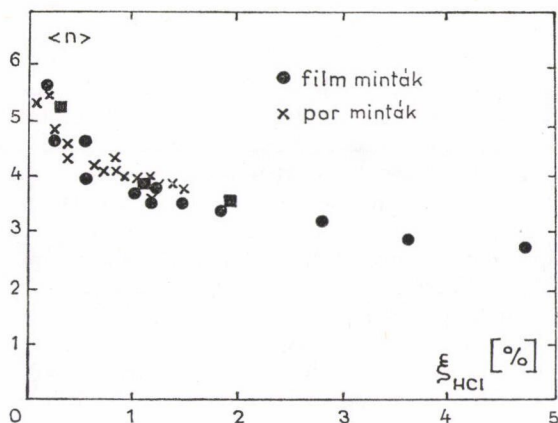
tás kb. $2,3 \times 10^5$ spin/gramm spinsűrűségnek felel meg. Az abszolút spinsűrűségek — bár mintáról mintára kb. fél nagyságrenden belül szórnak — az Ouchi [70] által publikált mérések eredményeivel nagyságrendileg megegyeznek. Megjegyezzük, hogy a kísérleti körülményekből adódóan az abszolút spin sűrűség meghatározása a fentínél pontosabban nem várható.

Az első 0,5—1 % konverzió intervallumot kivéve az $[R]=f(\xi_{\text{HCl}})$ görbe közel lineáris lefutású. Feltehető, hogy a degradációs folyamat kezdetén levő, meredekebb szakasz a hidrogénklorid konverzió mérési hibáját tükrözi. Ha ugyanis a reakcióterben visszamaradt hidrogénklorid által okozott kb. 0,5—1 % konverzió hibát figyelembe vesszük, — a lineáris szakaszt $\xi_{\text{HCl}} = 1\%$ -al eltoljuk $+\xi$ irányban — a mérési pontokhoz illesztett egyenes tengelymetszete az origó közelében lesz. Az ilyen, az origót metsző, lineáris lefutású spinsűrűség Kelen [72] és munkatársai korábban közölt, oldatban végzett méréseivel összhangban van. (A 4.3. ábrán bemutatott gyökkoncentráció vs. konverzió összefüggéssel kapcsolatban megjegyezzük, hogy a lineáris szakaszon az elbomlott monomer egységekre jutó párosítatlan elektronok száma konstans.)



4.4. ábra. Az ESR jel szélessége a NCl konverzió függvényében (■-al az összehasonlító méréseket jelöltük)

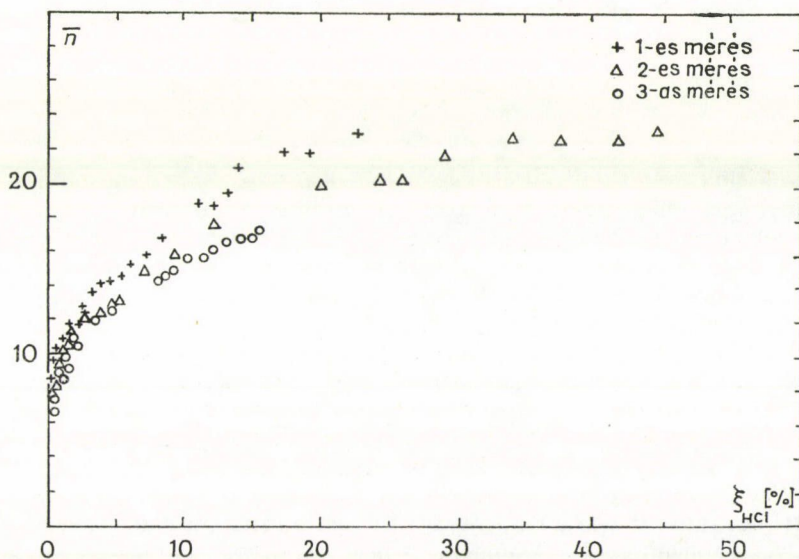
Több független, az ESR üregben végrehajtott degradáció során mértük a szinglett ESR jel szélességének a hidrogénklorid konverziótól való függését. Ezek közül háromnak az eredményeit a 4.4. ábrán mutatjuk be. Az ESR jel szélessége a degradáció során növekvő HCl konverzióval csökken és nagy konverzióknál ($\xi > 25\%$) $7\text{--}8 \times 10^{-4}$ Tesla körüli határértékhez tart. Hangsúlyozzuk, hogy a jelszélesség mért csökkenése meglepő. Mint tudjuk, csökkenő jelszélesség ugyanis a polienil gyökök konjugációs hosszának növekedésére utal. A degradáció során azonban — mint azt a 4.5. ábrán láthatjuk — a diamágnéses poliének konjugációs hossza csökken. A poliének konjugációs hosszát a geometriai eloszlásukat felhasználva (308. old.) UV—VIS spektrumuk alapján határozhatjuk meg. Degradált PVC film és tetra-



4.5. ábra. A poliének átlagos konjugációs hossza a hidrogénklorid konverzió függvényében (■-al az összehasonlító méréseket jelöltük)

hidrofuránban oldott por spektrum alapján a poliének átlagos konjugációs hosszát számoltuk ki a hidrogénklorid konverzió függvényében.

A polienil gyököknek a 2.6. fejezetben leírt osztályozása szerint a degradált PVC mátrix alapvetően „2. típusú” gyököket tartalmaz. A jelszélességből a konjugációs hossz a $\Delta H_{pp} = c/\sqrt{n}$ formulát használva meghatározható. A formula segítségével meghatározott, a 4.4. ábrán feltüntetett mért jelszélességekhez tartozó konjugációs hosszakat a 4.6. ábrán mutatjuk be. Mint a 2.6.1. fejezetben megmutattuk,



4.6. ábra. A polienil gyökök átlagos konjugációs hossza a hidrogénklorid konverzió függvényében

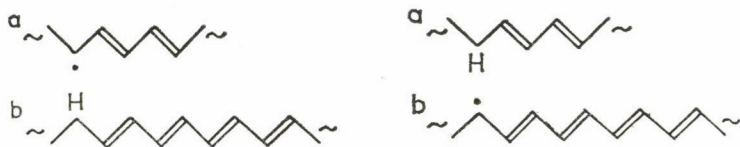
a kapott számértékek főleg nagy konjugációs hosszak ($n > 10$) esetén a valódi szám-
 átlagokat lényegesen meghaladják. A számított értékek bemutatásával célunk az
 átlagos konjugációs hossz változás tendenciájának szemléltetése.

A polienil gyökök energiaszerkezetére vonatkozó fejezetben a gyökök (para-
 mágneses π -fáziskönyök) konjugációs hosszára vonatkozóan néhány megjegyzést
 tettünk. Megemlítettük, hogy a polienil gyök minimális energiájú, stabil állapotában
 $l_{\text{opt}} = 12-14$ konjugációs hosszon delokalizált. Ha a konjugációs hossz ennél kisebb,
 a gyök magasabb energiájú állapotban van. További CH egységeknek ehhez rövid
 polienil szekvenciához történő hozzáadása a gyök energiáját egy bizonyos szegmens-
 hossz (l_{opt}) eléréséig csökkenti. A 12-14 konjugált $-(CH)_2-$ egységből álló poli-
 enil szekvencia energiája újabb CH atomcsoportok hozzáadásával azonban tovább
 már nem csökkenthető. A degradált PVC mátrixban képződő polienil gyökök ESR
 jelének szélességére vonatkozó méréseinket a fentieket felhasználva magyarázzuk.

Kísérleteink szerint — mint megmutattuk — növekvő konverzióval a poliének
 átlagos hossza csökken, a polienil gyökök átlagos hossza viszont nő.

A degradáció kezdetén a poliének UV-VIS spektrumából és a polienil gyökök
 ESR spektrumából meghatározott konjugációs hosszai jó közelítéssel azonosak,
 $\langle n \rangle = \bar{n} \cong 5-6$. Ez a „kiterjedés” az előbb elmondottak értelmében a polienil gyö-
 kökre nézve energetikailag kedvezőtlen. Ezen ok miatt kémiai reakcióba lépésük,
 hosszabban konjugált polién szegmensre történő „diffúziójuk”, vagy egyéb, nagyobb
 konjugációs hosszat eredményező folyamatban való részvételük viszonylag nagy
 valószínűségű.

Az alábbi ábrán egy olyan lehetséges kémiai reakció sémáját mutatjuk be,
 melynek során a polienil gyök effektív konjugációs hossza növekedhet:



Az (a)-val jelölt, rövid polienil gyökkel szomszédos (b) diamágneses polién bejelölt
 hidrogénatomja allil helyzetben van, így viszonylag gyengén kötött. Ez a hidrogén-
 atom a (\cdot) párosítatlan elektronnal kémiai kötést képezhet. A reakció következtében
 a (b) jelű láncon egy párosítatlan elektron marad vissza, azaz a rövidebb (a) polién
 szekvencia diamágneses, a hosszabb (b) pedig paramágneses lesz. A reakció hajtó-
 erejét az biztosítja, hogy a képződő polienil gyök a kiindulási állapothoz képest
 alacsonyabb energiájú állapotba kerül. Az ilyen jellegű folyamatok mindaddig
 dominánsak, míg a polienil gyökök átlagos konjugációja el nem éri az l_{opt} értéket.
 Az ESR jel szélességének így először csökkennie kell, majd fokozatosan egy állandó
 értéket felvéve a konverziótól lényegében függetlenné kell válnia. Ez a viselkedés
 a mérési eredményeikkel teljesen összhangban van.

A PVC degradáció során az ESR jel szélességének csökkenését és konstans
 határértékhez való tartását a fentieket összefoglalva azzal magyarázzuk, hogy a jelet
 eredményező polienil gyökök konjugációs hossza a degradáció folyamán az energe-
 tikailag optimális konjugációs hosszhoz tart. A poliének átlagos hossza viszont a
 másodlagos reakciók következtében csökken (Tüdös [42], Kelen [46]).

A konjugációs hosszaknak a $\Delta H_{pp} = c/\sqrt{n}$ formulával megbecsült számszerű értékei nagyobbak, mint az elméletileg várt értékek. Ez szerintünk a használt becslés korábban elemzett hibáiból ered. (A $\xi=0$ -ra exponált átlagos gyökhossz túrhető becslésnek tekinthető, mivel a jelszélesség ekkor még viszonylag nagy.)

Felmerülhet a kérdés: vajon a degradált PVC-ben van-e elegendő mennyiségű, megfelelő hosszúságú polién ahhoz, hogy az adott koncentrációjú polienil gyökök átlagos konjugációs hossza 10–12 legyen? Annak ellenére, hogy — amint láttuk — az átlagos poliénhossz kicsi, a következő egyszerű numerikus becslés segítségével belátjuk, hogy a kérdésre igenlő válasz adható.

Tüdős [51] korábban tárgyalt kinetikai modellje értelmében a poliének hosszúság szerinti eloszlása geometriai eloszlás. Az n konjugációs hosszú poliének p_n koncentrációja az átlagos poliénhossz, $\langle n \rangle$, és a ξ HCl konverzió segítségével kifejezhető (308. old.):

$$p_n = \left(\frac{1}{\langle n \rangle}\right)^2 \left(1 - \frac{1}{\langle n \rangle}\right)^{n-1} \cdot \xi_{\text{HCl}}. \quad (4.1)$$

Ezt felhasználva az m -nél nagyobb konjugációs hosszal rendelkező poliéneknek az összes poliének számához viszonyított hányada, C_m :

$$C_m = \sum_{n=m}^{\infty} p_n / \sum_{n=1}^{\infty} p_n = \left(1 - \frac{1}{\langle n \rangle}\right)^{m-1} \quad (4.2)$$

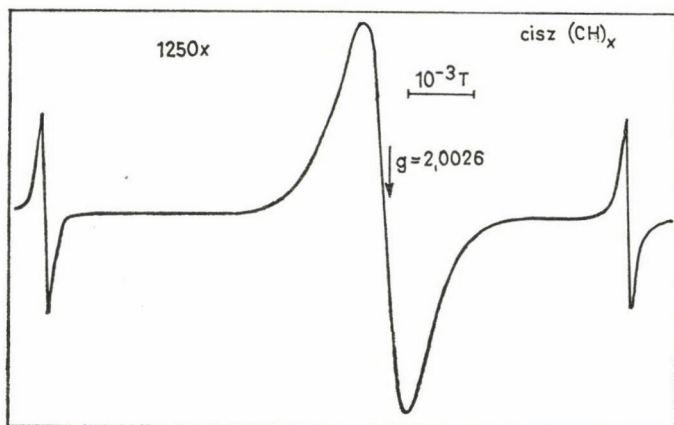
Ha $m=10$ és $\langle n \rangle=3$, akkor $C_m = 2,6 \times 10^{-2}$. Másszóval az összes poliének 2,6%-a a tíz konjugált $-(\text{CH})_2-$ egységgel megegyező, vagy nagyobb hosszúságú. (Megjegyezzük, hogy ez az érték a hosszú poliének tényleges mennyiségét kissé meghaladhatja, mivel a poliének a másodlagos reakciókban fogynak.) Amennyiben $\xi_{\text{HCl}}=5\%$ és $\langle n \rangle=3$, a degradált PVC 1 grammjában $1,6 \times 10^{20}$ db polién szekvencia van. A mért spin koncentráció 3×10^{16} spin/gramm. Ez azt jelenti, hogy az összes poliéneknek csupán $1,9=10^{-2}$ százaléka paramágneses, viszont 2,6%-ának konjugációs hossza nagyobb vagy egyenlő, mint tíz. A hosszú poliéneknek így elegendően nagy a koncentrációja ahhoz, hogy minden polienil gyök megfelelő hosszúságú (l_{opt}) szekvencián legyen.

4.2. ESR vizsgálatok poliacetilénben

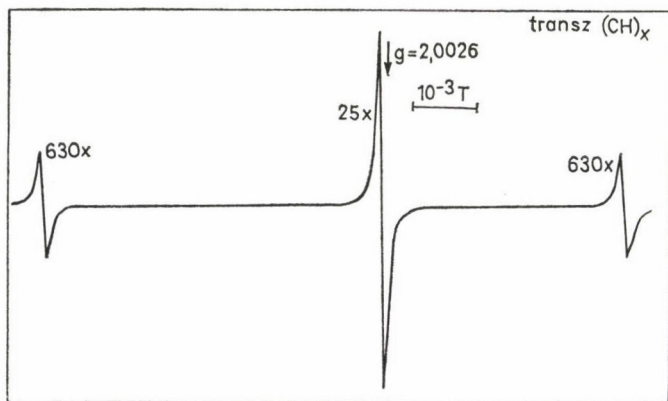
4.2.1. Az ESR spektrumok jellemzői

Mint említettük, a paramágneses centrumok a poliacetilénben a cisz-transz izomerizáció során keletkeznek. Az alacsony hőmérsékleten (-78°C -on) előállított cisz $(\text{CH})_x$ -ben néhány % transz izomer — így párosítatlan spinű elektronok is — képződik a polimernek a reakcióedényből történő eltávolításakor. Ez a néhány % transz tartalom és a párosítatlan spinű elektronok képződése a hőmérsékletnek a polimerizációt követően szobahőmérsékletre történő növekedése miatt bekövetkező, kis sebességű izomerizáció eredménye. Megjegyezzük, hogy a vizsgált mintákat a reakcióedényből eltávolítva néhány percig levegő érte. A szorbeált oxigén szintén kis sebességű izomerizációt vált ki. Ezen kívül bizonyos mértékben befolyásolhatja az ESR spektrumok jellemzőit is. A spektrumokat ezért olyan mintákon vettük fel, amelyeket előzőleg 100 Pa-nál kisebb vákuumra leszívott és leforrasztott ESR cső tartalmazott.

A cisz izomerben gazdag poliacetilén (a továbbiakban cisz poliacetilén) a $g=2,0026$, a szabad elektron g faktorához közeli ESR jele szinglett. Értelmezésünk szerint a jelet 2. típusú, rövid konjugációs hosszú, transz módosulatú polienil gyökök okozzák. A jel szélességét — mint tudjuk — a paramágneses transz szegmensek konjugációs hossza határozza meg. Mivel a vizsgált cisz $(CH)_x$ filmek „izomerizációs előléte” a kísérleteket megelőzően különböző lehet, a kapott szinglett szélessége és intenzitása (azaz a transz módosulatú gyökök száma és konjugációs hossza) mintáról mintára változhat. A 4.7. ábrán egy jellemző spektrumot mutatunk be ($g=2,0026$, $\Delta H_{pp}=7 \times 10^{-4}$ Tesla).



4.7. ábra. 5% transz izomert (IR adat) tartalmazó cisz poliacetilén ESR spektruma. A két szélső, keskeny jel a Mn^{++} referencia III. és IV. vonala



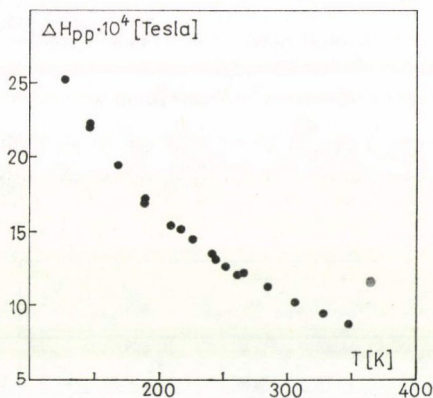
4.8. ábra. 98% transz izomert (IR adat) tartalmazó transz poliacetilén ESR spektruma. A két szélső, keskeny jel a Mn^{++} referencia III. és IV. vonala

Ismert, hogy az ESR vonal kiszélesedésében elvileg a g faktor anizotrópiája szerepet játszhat (Poole [73]). Az anizotrópia létét X és Q sávú mérések összehasonlításával dönthetjük el. Méréseink szerint a cisz $(CH)_x$ ESR szinglettjének vonalszélessége nem függ a mikrohullámú frekvenciától. Az X és Q sávban a vizsgált 96 % cisz izomert tartalmazó minta ESR szinglettjének vonalszélessége egyaránt $7,0 \pm 0,2 \times 10^{-4}$ Tesla volt. A jelszélesség frekvencia függetlensége izotrop g faktorra utal. Méréseink szerint tehát a cisz poliacetilén ESR jelének g faktora izotrop, a jel kiszélesedésében így nem játszik szerepet.

A cisz $(CH)_x$ ESR jele melegítés (izomerizáció) hatására elkeskenyedik (mozgási keskenyedés), intenzitása pedig megnő (nő a transz szegmensek hossza és száma). A lokalizált, 2. típusú gyökből az izomerizáció hatására mozgékony, 3. típusú gyök lesz. A 4.8. ábrán a transz $(CH)_x$ -re jellemző ESR jelet mutatunk be ($g=2,0026$, $\Delta H_{pp}=7 \times 10^{-5}$ Tesla).

4.2.2. A transz $(CH)_x$ ESR spektruma: hosszú polienil gyökök

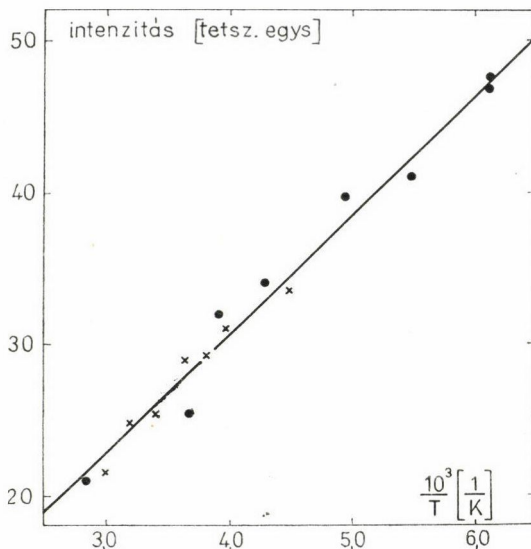
Vizsgálatuk a termikusan izomerizált, transz módosulatú poliacetilén ESR szinglett spektrumának félérték szélességét és spin szuszceptibilitását a hőmérséklet függvényében. A kapott eredményeket a 4.9. és 4.10. számú ábrákon mutatjuk be.



4.9. ábra. Transz poliacetilén ESR jelének félérték szélessége a hőmérséklet függvényében

A transz $(CH)_x$ ESR jel szélessége csökkenő hőmérséklet hatására növekszik. Ez az eredmény a jelet okozó spines szoliton mozgásának a csökkenő hőmérséklet hatására bekövetkező lassulását jelzi. A spin szuszceptibilitás, χ_p $\chi_p = f(1/T)$ függése lineáris, a szuszceptibilitás Curie típusú hőmérsékletfüggést mutat. (Szobahőmérsékleten kb. minden 3000 szénatomra jut egy párosítatlan spinű elektron. Ez az érték a cisz poliacetilén spektrumából számítottak tízszerese.)

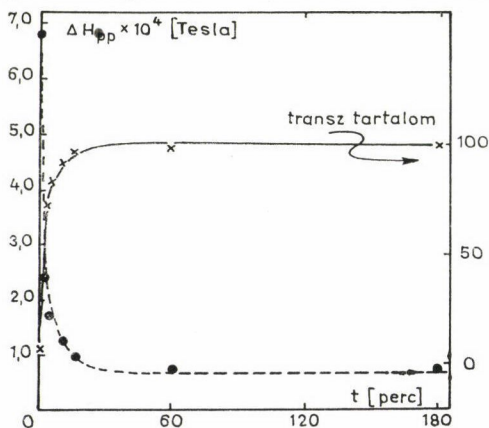
A spin szuszceptibilitás Curie típusú viselkedése arra utal, hogy a spincentrumok nem rendelkeznek elektromos töltéssel. Ekkor ugyanis — az elektromos vezetőképesség aktivált jellege miatt — a spin szuszceptibilitás hőmérsékletfüggése $\chi_p = (C/T) \exp(-\Delta E/T)$ alakú, aktivált típusú lenne.



4.10. ábra. Transz poliacetilén spin szuszeptibilitása (az ESR jel intenzitása) a reciprok hőmérséklet függvényében [(•)-hűtés, (x)-melegítés]

4.2.3. A termikusan aktivált cisz-transz izomerizáció követése

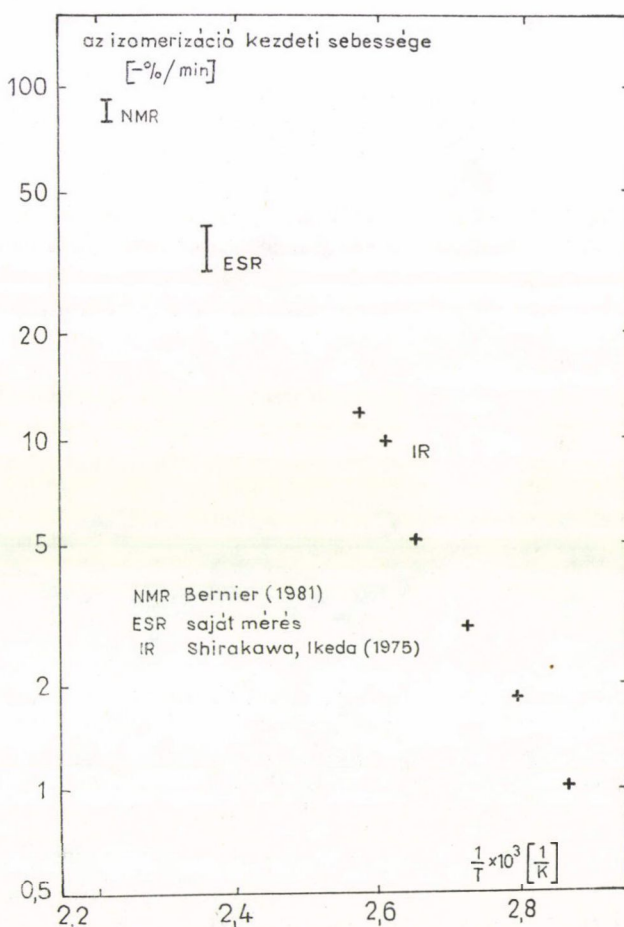
Poliacetilén 150 °C-on lejátszódó cisz-transz izomerizációja közben az anyag szinglett ESR jelének szélességét vizsgáltuk a hőkezelési idő függvényében. A jel-szélesség termikus izomerizáció esetén kapcsolatba hozható a cisz-transz aránnyal (Shirakawa [16]). A jel keskenyedése — azaz a transz módosulatú, paramágneses



4.11. ábra. A kezdetben cisz módosulatú poliacetilén ESR jelének félérték szélessége és a transz tartalom a hőkezelési idő függvényében, a 150 °C-on lejátszódó cisz-transz izomerizáció során

polienil gyökök hosszának növekedése ugyanis lineáris kapcsolatban áll a transz tartalommal. A jelszélesség és a transz tartalom hőmérsékletfüggését a 4.11. számú ábrán mutatjuk be.

A mérés eredményét felhasználva kiszámítottuk az izomerizáció kezdeti sebességét 150 °C-on. Az így kapott adatot berajzoltuk az *Ito* [17] és munkatársai által infravörös mérésekből származtatott, az izomerizáció kinetikájára vonatkozó Arrhenius egyenesbe. Amint az a 4.12. ábrán látható, ESR mérések segítségével a kapott eredmények szerint az izomerizáció kinetikája nyomon követhető. Az Arrhenius egyenesbe berajzoltuk az izomerizáció sebességére vonatkozó, ^{13}C NMR spektrum alapján meghatározott eredményt is. (A mérés *Bernier* [74] munkája.) A ^{13}C NMR spektrum segítségével az izomerizáció során változó szén-szén távolságokon keresztül az izomerizáció kinetikája szintén nyomon követhető.



4.12. ábra. A cisz-transz izomerizáció kezdeti sebessége a reciprok hőmérséklet függvényében

4.2.4. A poliacetilén ESR jelének telítési tulajdonságai

Az ESR spektrumok felvételekor a mintában abszorbeálódott energia perturbálja a párosítatlan elektronspínnek a Zeeman nívók közötti, egyensúlyi Boltzmann populációját. Ha az alkalmazott mikrohullámú tér térerőssége megfelelő nagy, a Zeeman szintek populációi kiegyenlíthetnek (végtelen spinhőmérséklet). Ebben az esetben az eredő energia abszorpció a mintában zérus, az ESR jel eltűnik. Ez a jelenség a spektrum telítése. A Zeeman nívók populációinak kiegyenlítődése, azaz a telítés ellen hatnak a különböző relaxációs folyamatok. A spektrum telítési tulajdonságaiból a relaxációs folyamatokra, de számos más jelenségre vonatkozóan is fontos információkat kaphatunk (Poole [73]).

Homogén módon kiszélesedett ESR jelek telítése esetén a jel amplitúdója a mikrohullámú tér erősségének függvényében rohamosan csökken. A jel ΔH_{pp} vonalszélessége az ún. s telítési faktor négyzetgyökével fordítottan arányos: $\Delta H_{pp} \propto s^{-1/2}$. (Az s faktor a H1 mikrohullámú tér értékétől, a giromágneses tényezőtől és a $T_1 \cdot T_2$ relaxációs idők szorzatától függ (Poole [73]).) Nem telített jeleknél $s=1$, a telítés során pedig növekvő H1 mikrohullámú tér hatására értéke fokozatosan csökken. Homogén jelek vonalszélessége így a telítés folyamán növekszik. Inhomogén módon kiszélesedett ESR jelek amplitúdója növekvő mikrohullámú tér hatására a homogén jelekhez hasonlóan szintén csökken, de a jelszélesség viselkedése eltérő. A jelet alkotó összetevők telítési sajátosságai ugyanis különbözhetnek, így eredőjük szélességének a mikrohullámú tértől való függését a konkrét paramágneses rendszer jellemzői határozzák meg.

A telítési tulajdonságok vizsgálata során megmérük a minták ESR jelének ΔH_{pp} vonalszélességét és a jelnek a nem telített Mn^{++} —MgO referencia jeléhez viszonyított relatív amplitúdóját a mikrohullámú teljesítmény függvényében. A mikrohullámú mágneses tér — mint ismeretes — a teljesítmény négyzetgyökével arányos. Az előző bekezdésben elmondottak szerint a relatív amplitúdó csökkenése a vizsgált jel telítésekor következik be. Ekkor, homogén módon kiszélesedett jeleknél, a vonalszélesség növekedését várjuk.

A rövid transz polienil gyököket tartalmazó cisz, illetve termikusan izomerizált transz, továbbá oxigén hatásának kitett cisz poliacetilén spektrumainak telítési tulajdonságait vizsgáltuk. A mérések eredményeit a 4.13., 4.14. számú ábrákon mutatjuk be.

A relatív amplitúdó mérések eredményei szerint a levegő hatásának kitett cisz, illetve a transz (CH) $_x$ ESR jele a cisz (CH) $_x$ jeléhez képest nehezebben telíthető.

Mérésünk értelmezése előtt Holczer [75] munkájára utalunk, aki oxigén szennyvezetéseknek a (CH) $_x$ ESR spektrumára gyakorolt hatását vizsgálta. Megállapította, hogy transz (CH) $_x$ levegőre történő exponálása a spin dinamikát lényegesen befolyásolja. Az abszorbeált oxigén lokális környezetében az ESR jelet okozó mozgékony paramágneses szolitonok lokalizálódnak. A transz (CH) $_x$ ESR spektruma így egy mobilis spincentrum keskeny ESR jelének és az oxigénen „csapdázódott” kevésbé mozgékony paramágneses szoliton szélesebb ESR jelének eredője. A szélesebb jel már kis oxigén koncentrációknál érezheti hatását, és „maszkolhatja” a keskeny — mobilis spincentrumoktól származó — ESR jelet.

A fent elmondottak alapján a telítésre vonatkozó méréseink eredményeit a következő módon értelmezzük:

A cisz (CH) $_x$ a termikus izomerizációt megelőzően, a mintát tartalmazó ESR cső leszívata és leforrasztása előtt már tartalmazott kis koncentrációban oxigén szennyezést. A termikus izomerizáció közben — mint láttuk — nő a transz szegmensek konjugációs hossza, azaz a paramágneses szolitonok mozgására rendelkezésre álló „pálya” hossza. A spincentrumok így a kis mennyiségben jelen levő oxigén szennyezésekhez nagyobb valószínűséggel kerülnek közel, kölcsönhatásuk valószínűsége a cisz (CH) $_x$ -hez viszonyítva megnő. Az oxigénnel való valószínűbb kölcsönhatás erősebb relaxációt eredményez. Így a transz (CH) $_x$ ESR jele a cisz (CH) $_x$ jeléhez képest nehezebben telíthető.

A cisz poliacetilént levegőn tartva nő az abszorbeált oxigén mennyisége. Ezzel egyidejűleg szintén nő a poliéneken levő paramágneses centrumok és az oxigén kölcsönhatásának valószínűsége. Értelmezésünk szerint a megnövekedett valószínűségű kölcsönhatás következtében erősödő relaxációs folyamat az oka annak, hogy a levegő hatásának kitett cisz (CH) $_x$ ESR jelét nagyobb mikrohullámú tér telíti. (Megjegyezzük, hogy a relatív amplitúdó telítésének méréséből csak a $T_1 \cdot T_2$ spin-rács, illetve spin-spin relaxációs idők szorzatára vonatkozóan vonhatunk le következtetéseket. Ismert, hogy homogén jel esetén a jelszélességet a T_2 relaxációs idő határozza meg. Inhomogén módon kiszélesedett jelnél azonban — a cisz (CH) $_x$ esetén a fel nem bontott hiperfinom szerkezet ilyet eredményez — a jel szélessége nem hozható közvetlen kapcsolatba a T_2 -vel.)

Megmértük a poliacetilén ESR jelének szélességét különböző cisz-transz arány esetén és levegő hatásának kitett cisz mintán, a mikrohullámú tér erősségének függvényében. Növekvő mikrohullámú térerősség hatására a transz módosulatú poliénekből álló minták jelszélessége növekszik. A transz minták esetén a spincentrumok mozgása miatt a hiperfinom csatolás erősen lecsökken. Az izomerizáció hatására csökkenő jelszélesség fokozatosan homogén eredetű lesz. A ΔH_{pp} jelszélesség tér-függése ezt tükrözi. A ΔH_{pp} azonban nem lesz tisztán homogén eredetű, hiszen kialakulásában az oxigén szennyezéseknek, és a megmaradó gyenge hiperfinom csatolásnak is szerepe van. Ezeknek a befolyásoló tényezőknek a hatása miatt a jelszélességből T_2 spin-spin relaxációs idő származtatása nem megalapozott.

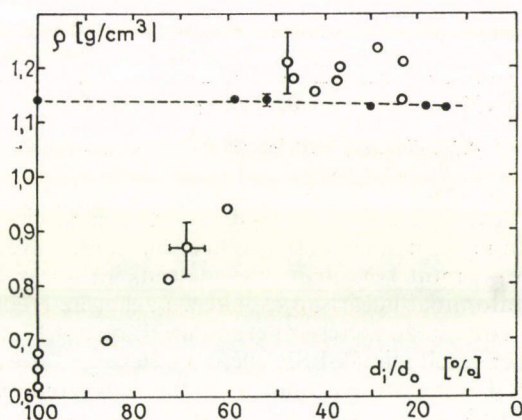
A cisz (CH) $_x$ jelszélessége a vizsgált tartományban nem függ a mikrohullámú tértől annak ellenére, hogy a jel relatív amplitúdója telítést mutat. Ez a cisz (CH) $_x$ ESR jelének inhomogén kiszélesedésére utal. Megjegyezzük, hogy az izomerizáció hatására csökkenő jelszélesség, ugyanakkor növekedő $T_1 T_2$ szorzat szintén a cisz (CH) $_x$ ESR jelének inhomogén kiszélesedését támasztja alá.

Oxigén hatására az ESR jel g -faktora nem változik, a jelszélesség azonban megnő és térfüggő lesz. A g -faktor változatlan értéke arra utal, hogy az oxidált mintákban is polienil gyökök okozzák az ESR jelet. Az oxigén azonban befolyásolja a spektrum telítési tulajdonságait. Az oxidált cisz minták megnövekedett jelszélessége és ennek a mikrohullámú tér erősségétől való függése arra utal, hogy a vizsgált minták ESR jele növekvő oxigén tartalommal homogén módon, fokozatosan kiszélesedik. A jel szélességét feltehetően az oxigénnel történő, erős spin-spin relaxáció határozza meg.

4.2.5. A poliacetilén hengerlés hatására bekövetkező cisz-transz izomerizációja

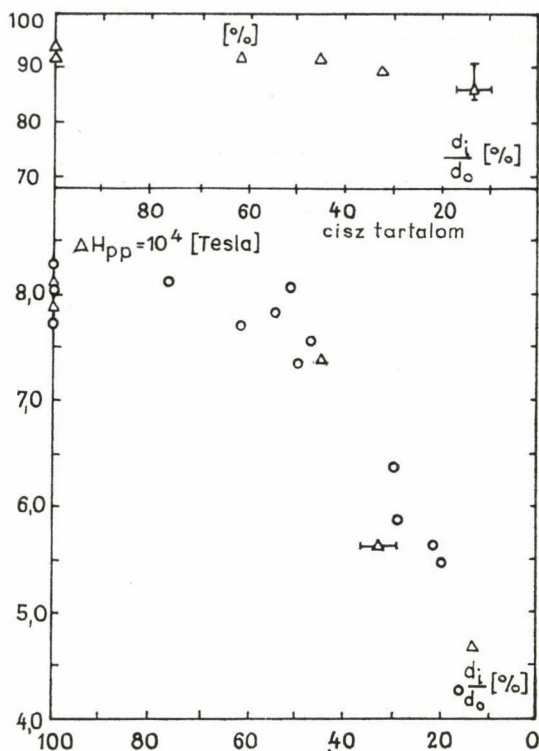
Mechanikai hengerlésnek alávetett cisz (CH) $_x$ filmek ESR spektrumát vizsgáltuk. Mértük a filmek vastagságát a hengerlés előtt (d_0) és után (d_i). A hengerlés hatásosságának jellemzésére a d_i/d_0 arányt használtuk. (A felhasznált d_i , ill. d_0 értékek legkevesebb 15 vastagság mérés átlagai.) Króm felületű hengert használva a hengerek közti rést 10 μ m-es lépésekben csökkentettük. A hengerlést szobahőmérsékleten, levegőn végeztük. A minták egyformán kb. 10 percig voltak levegőn. Ezután a vizsgált anyagokat ESR csőbe tettük, 100 Pa-nál kisebb vákuumra szívattuk le és leforrasztottuk. A hengerlést követő leszívattással és a mintáknak egyforma ideig való levegőn tartásával biztosítottuk, hogy a szorbeált oxigén esetleges hatása az ESR spektrum jellemzőire minden vizsgált minta esetén azonos legyen.

A 4.15. ábrán a (CH) $_x$ sűrűségét ábrázoltuk a redukált vastagság (d_i/d_0) függvényében. A poliacetilént (d_i/d_0) kb. 50%-ig hengerelve a polimer filmeknek a tömegükből és a méretükből származtatott makroszkopikus sűrűsége elérte a kristályos szálak sűrűségét (1,14 g/cm 3). A kristályos szálak sűrűségét a porózus szerkezetű poliacetilént nedvesítő CCl — toluol elegy sűrűséggradiensét tartalmazó oszlopban, flotációs sűrűségméréssel határoztuk meg. Mint várható, a hengerlés során az utóbbi mérés a d_i/d_0 -tól függetlenül konstans értéket adott. A sűrűségmérés szerint 50% hengerlés a (CH) $_x$ szálak közti üregeket eltüntette, a polimer film kompakt, kemény lett.



4.15. ábra. A poliacetilén filmek sűrűsége a redukált vastagság függvényében:
(·)-flotációs mérések (○)-látszólagos sűrűség

Az ESR vonalszélességet (ΔH_{pp}) és (az IR spektrumból származtatott) cisz-transz összetételeket — mint a d_i/d_0 függvényét a 4.16. ábrán tüntettük fel. (ESR és IR méréseket ugyanazon a mintákon is végeztünk. Ezeket az eredményeket az ábrán külön tüntettük fel.) A d_i/d_0 100 és 50% közötti értékénél, azaz amíg a filmek makroszkopikus sűrűsége eléri a kristályos fibrillák sűrűségét, a ΔH_{pp} jelszélesség konstans marad. A további hengerlés hatására az ESR jelszélesség erősen csökkenni kezd, a poliacetilén transz tartalma pedig gyengén növekedik.



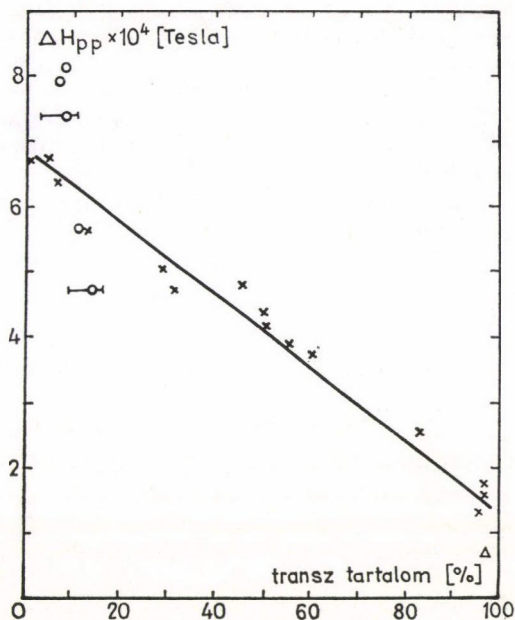
4.16. ábra. Az ESR jelszélesség és a cisz-transz összetétel a redukált vastagság függvényében

Shirakawa [16] és munkatársai az ESR jel szélességét vizsgálták a termikusan izomerizált $(CH)_x$ transz tartalmának függvényében. Eredményeik szerint, a termikus izomerizáció esetén — mint korábban már utaltunk rá — az ESR jel szélessége a növekvő transz tartalommal lineárisan csökken. Ezeket az eredményeket és a saját, hengerelt $(CH)_x$ -re vonatkozó méréseinket mutatjuk be a 4.17. ábrán. Mint látható, méréseink során a hengerelt minták ESR jelének szélessége a növekvő transz tartalom függvényében gyorsabban csökken, mint a termikusan izomerizált poliacetilénben. A hengerelt $(CH)_x$ ESR spektrumának $4,7 \times 10^{-4}$ Tesla vonalszélességénél a transz tartalom kisebb, mint 14%. Ezzel szemben termikus izomerizáció esetén ugyanehhez a vonalszélességhez 32–46% transz összetevő tartozik.

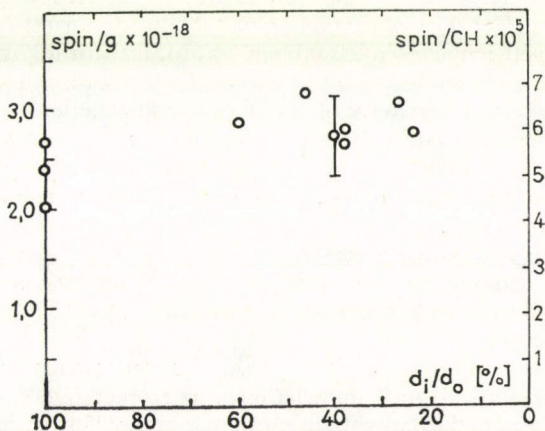
A kiindulási cisz poliacetilén ESR jelszélessége — mint korábban utaltunk rá — a minta előéletének függvénye. Esetünkben így Shirakawa és a mi cisz poliacetilénre vonatkozó adatunk közötti eltérés másodlagos fontosságú. Megemlítjük, hogy a hengerelt mintákat termikusan izomerizálva 7×10^{-5} Tesla vonalszélességet kaptunk. Ez a kis érték arra utal (Holczér [75] és társai munkája alapján), hogy a hengerlés során abszorbeált oxigén a mérési eredményeket lényegében nem befolyásolja.

Megmértük a hengerelt minták spin szuszeptibilitását is (χ_p) a redukált vastagság függvényében (4.18. ábra). A spin szuszeptibilitás a hengerlés függvényében $\pm 15\%$ -os hibán belül nem változott.

Méréseink eredményét összefoglalva, a hengerlés hatására az ESR jel szélessége erősen csökken, míg a spin szuszeptibilitás lényegében nem változik, a transz tartalom pedig csak igen gyengén növekszik. A továbbiakban ezeket az eredményeket kívánjuk értelmezni.



4.17. ábra. Az ESR jel szélessége a transz tartalom függvényében (x) termikus izomerizáció (Shirakawa [16]), (○) hengerlés hatására bekövetkező izomerizáció, (Δ) hőkezelés után



4.18. ábra. A spin szuszeptibilitás a redukált vastagság függvényében

Mint tudjuk, a kiindulási cisz (CH) $_x$ mátrixban 2. típusú polienil gyökök, lokalizált, spines szolitonok vannak. A jelszélesség mért csökkenése ilyen típusú gyökök esetén a konjugációs hossz növekedését jelzi (2.13. összefüggés). A jelszélességnek a hengerlés hatására 8×10^{-4} Tesláról $5,5 \times 10^{-4}$ Teslára való csökkenése — az előbb említett összefüggést felhasználva — a transz, 2. típusú polienil gyökök konjugációs hosszának duplázódására utal. (Tudjuk, hogy a polienil gyökök poliacetilénben transz izomer módosulatúak.)

A mért spinkoncentráció 5×10^{-5} spin/CH egység. A kiindulási jelszélességhez — becslésünk alapján — kb. 20 (CH) $_x$ átlagos gyökhossz tartozik. Amennyiben a transz gyökök hossza megduplázódik, számuk viszont változatlan marad, a transz tartalom csak kis mértékben növekszik.

Mérési eredményeink szerint a hengerlést követően a transz szegmensek számával arányos spin szuszceptibilitás nem nő. Ez azt jelenti, hogy a hengerlés hatására új transz szegmensek nem képződnek. Az ESR jelszélesség csökkenése viszont arra utal, hogy a meglevő transz polienil gyökök hossza nő. A hengerlés így a poliacetilént kis mértékben izomerizálja azáltal, hogy a transz módosulatú gyökök konjugációs hosszát növeli.

Termikus izomerizáció esetén a meglevő transz polienil gyökök konjugációs hosszának növekedésén kívül „új” transz módosulatú szegmensek is aktiválódnak. Az „új” transz szegmensek képződése miatt, — a hengerléssel összehasonlítva — hőkezelt minták esetén adott jelszélességhez nagyobb transz hányad tartozik.

4.2.6. Az izomerizáció mechanizmusa az ESR vizsgálatok alapján

A polienil gyökök hossza a hengerlés hatására akkor kezd el növekedni, amikor a kristályos (CH) $_x$ szálak közül az üregeket a hengerlés „kinyomta” ($d_i/d_0 < 50\%$). További hengerlés a polimer filmeknek a hengerlés irányába eső hosszúságát megnöveli. Ennek a „nyújtásnak” a során a kristályos fibrilla tartományok irányítottak lesznek és lehetőség van a lánc szegmensek mozgására, rendeződésére is.

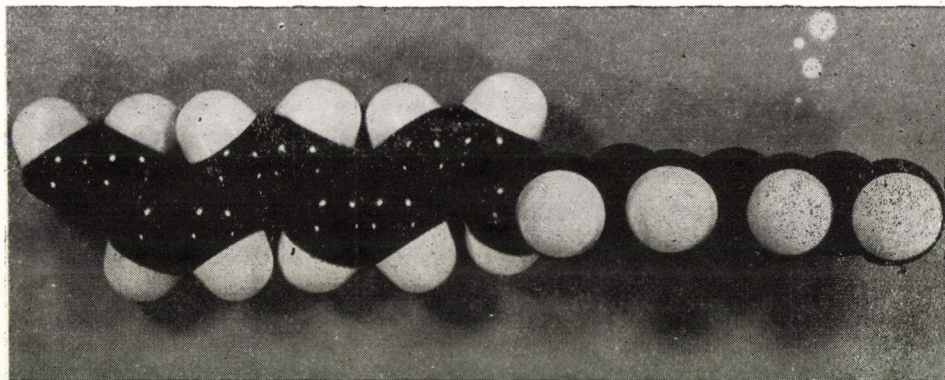
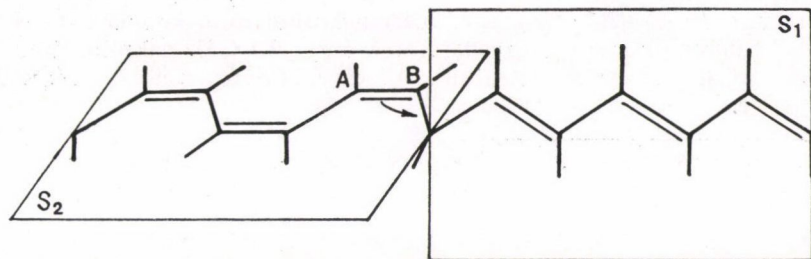
A cisz-transz izomerizáció — mint mondtunk — (2.3.1. fej.) párosítatlan spinek jelenlétében játszódik le. A párosítatlan spint tartalmazó struktúra merev szén-szén kettős kötések helyett lényegesen „lazábban” kötő, az atomokat elfordulni engedő szerkezet. Jelenlétének feltételezése a CH egységek elmozdulásához, az izomerizációs szegmensmozgáshoz energetikai okok miatt elegendehetetlen. A 4.19. ábrán egy olyan cisz-transz szegmenshatárt mutatunk be, amelyen egy párosítatlan spin van. (A szegmenshatárt molekulamodellen is lefényképeztük.) A valóságban a párosítatlan spin néhány szénatomon delokalizált. A bemutatott szegmenshatár a cisz láncrész felé könnyen elmozdulhat. Ezáltal lehetőség van a termodinamikailag stabilabb transz szegmens hosszának növekedésére.

A transz és a cisz szegmensek síkja egymásra feltételezhetően merőleges. Egy közös síkot tekintve ugyanis a kötésszögek torzulása nagyon erős lenne, energetikai instabilitást eredményezve.

A 4.19. ábrán az elképzelésünk szerinti elemi izomerizációs lépést is bemutattuk. A vázlatos mechanizmus szerint, mint látható, az izomerizációs reakciólépésben az atomok „forgása” a párosítatlan spin miatt nem a merev kettős, hanem egyes kémiai kötés körül lehetséges. Az ábrán bemutatott izomerizációs lépésben a párosítatlan elektron a jelölt kötés-rehibridizáció következtében az „A”-val jelölt C atomra toló-

dik el, és a „B”-vel jelölt C atom az S_1 síkba fordul ki. (Az elforgó C atomokon természetesen véges spinsűrűség van a σ kötések hátterén. A párosítatlan elektront jelölő „pont” a maximális spinsűrűségű hely.)

A vázolt izomerizáció közben — mivel a cisz és a transz szegmensek síkja egymásra merőleges — a szerkezeti rendezetlenség *lio* [18] említett munkájával összhangban a transz tartalommal nő. 50% transz tartalmat elérve a további izomerizáció során a poliacetilén az eredeti, egyhajtású kristályrendszerben újra kristályosodik.



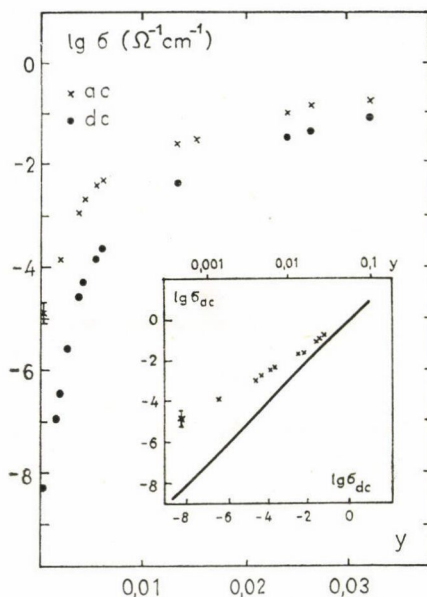
4.19. ábra. Cisz-transz szegmenshatár és az elemi izomerizációs lépés

A bemutatott modell — az izomerizációs lépés, a párosítatlan spinek feltételezésével bekövetkező szegmenshatár növekedés és a cisz-transz szegmensek síkja 90° -os hajlásának feltételezése — az izomerizációra vonatkozó, korábban említett kísérleti eredményekkel összhangban van.

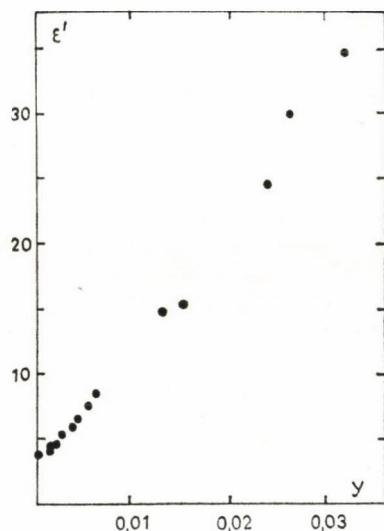
4.3. Jóddal szennyezett poliacetilén elektromos és dielektromos tulajdonságai

Az irodalmi részben elmondottak szerint, a poliacetilén elektromos tulajdonságai élénk érdeklődést váltottak ki. A poliacetilén szennyezett származékaiban az elektromos vezetés mechanizmusa — mint utaltunk rá — mind a mai napig vita tárgya. Munkánk egy részében mi is foglalkoztunk a jóddal szennyezett poliacetilén elektromos és dielektromos tulajdonságainak vizsgálatával. Az alábbi fejezetben ezekről az eredményekről számolunk be.

Tiszta és különböző koncentrációban jódot szennyező poliacetilén filmekből kivágott mintákon a dielektromos állandót (ϵ') és a 9,1 GHz mikrohullámú vezetőképességet (σ_{AC}) mértük szobahőmérsékleten, a szennyezés koncentrációjának függvényében. A jódot szennyezés mennyiségét tömegméréssel határoztuk meg. A szénatomokra vonatkoztatott 4,05% jódatomot tartalmazó poliacetilén mintán megmértük a dielektromos állandó és a vezetőképesség hőmérséklettől való függését a 100–310 K tartományban. Méréseink eredményei a 4.20.–4.23. ábrákon láthatók. A mikrohullámú (9,1 GHz) vezetőképességet és a dielektromos állandót az $\epsilon = \epsilon'(\omega) + i[4\pi\sigma_{AC}(\omega)/\omega]$ mért mikrohullámú, komplex dielektromos állandóból határoztuk meg. Az egyenáramú és a σ_{AC} 9,1 GHz mikrohullámú vezetőképességek közti eltérést is vizsgáltuk. Az egyenáramú vezetőképességet Mihály György mérte.



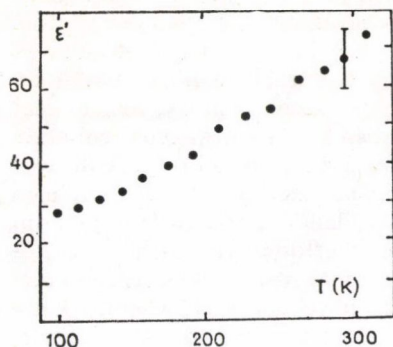
4.20. ábra. Jóddal szennyezett poliacetilén egyenáramú (σ_{DC}) és mikrohullámú (σ_{AC}) vezetőképessége a jódot koncentráció függvényében. Az inzertben a $\lg \sigma_{AC}$ -t a $\lg \sigma_{DC}$ függvényében ábrázoltuk.



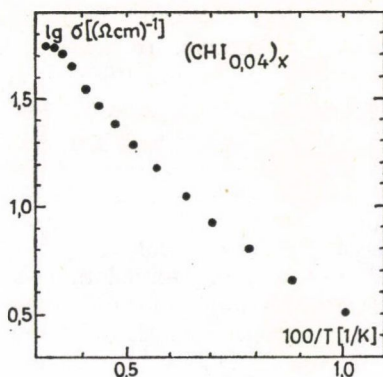
4.21. ábra. A jóddal szennyezett poliacetilén 9,1 GHz dielektromos állandója (ϵ') a jódot koncentrációjának függvényében

A tiszta poliacetilén mikrohullámú vezetőképessége szobahőmérsékleten $\sigma_{AC} \cong 10^{-5} (\Omega \text{ cm})^{-1}$, a 18% jódot tartalmazó polimeré pedig $\cong 30 (\Omega \text{ cm})^{-1}$. 3% szennyezés hatására a σ_{AC} kb. 5 nagyságrendet, a σ_{DC} kb. 7 nagyságrendet növekszik. A tiszta anyagot jóddal szennyezve a vezetőképesség kezdetben gyorsan, kb. 1% jódtartalom felett pedig lassabban növekszik. (Megjegyezzük, hogy a vezetőképességnek a szennyező koncentrációtól való függése egyéb szennyezők esetén is hasonló jellegű. Különbségek a „telítési” vezetőképesség számszerű értékeiben vannak.)

Tiszta polimer esetén szobahőmérsékleten a σ_{AC} és a σ_{DC} közötti 3–4 nagyságrend eltérés növekvő jódot koncentrációval fokozatosan csökken. Külön bemutatjuk



4.22. ábra. A 4,05% jódot tartalmazó poliacetilén dielektromos állandója a hőmérséklet függvényében

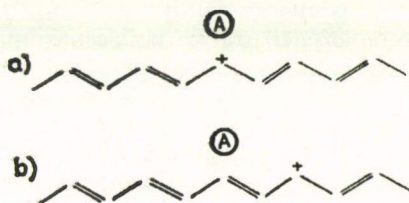


4.23. ábra. A 4,05% jódot tartalmazó poliacetilén mikrohullámú vezetőképessége a reciprok hőmérséklet függvényében.

a $\lg \sigma_{AC}$ -t mint a $\lg \sigma_{DC}$ függvényét. Ezen az ábrarészleten feltüntettük a $\lg \sigma_{DC}$ értékeknek megfelelő jód koncentrációt is. Ha nem lenne diszperzió, a kihúzott egyenest kapnánk.

A 9,1 GHz dielektromos állandó növekvő jód koncentráció hatására megközelítően lineárisan nő. Értéke csökkenő hőmérséklet hatására csökken, mint azt a 4,05% jódot tartalmazó minta esetén megmutattuk. A mérések kiértékelésekor a dielektromos állandót a szennyezésektől mentes polimerre vonatkoztattuk. Az így származtatott mennyiség így egy CH egységre jutó polarizációra jellemző, effektív tér közelítésben.

A dielektromos állandóra vonatkozó méréseink értelmezésénél kezdetben feltételeztük, hogy az ϵ' növekedése a szennyezés hatására a lánc mentén létrejövő, polarizálható, kötött centrumokkal, elektromos töltéssel rendelkező szolitonokkal kapcsolatos. Ilyen szerkezetet a 4.24. ábrán szemléltetünk:



4.24. ábra. Elektromosan töltött szoliton alap — (a) és első gerjesztett (b) állapota (A kötésalternáció hibája kb. 20–24 szénatomra terjed ki.)

Homogén eloszlású, jól polarizálható centrumok esetén azonban a dielektromos állandó mért közel lineáris koncentrációfüggése (4.21. ábra) nem várható. A polarizált centrumok dipol-dipol kölcsönhatása miatt a lineárisnál lényegesen erősebb koncentrációfüggés és már kis szennyező koncentráció esetén is polarizációs katasztrófa várható.

A $(\text{CH})_x$ elektromos tulajdonságai — így dielektromos állandója — az alábbiakban leírt módon, *Tomkiewicz* [35] elképzelésével összhangban magyarázhatók. Eszerint — mint említettük — a $(\text{CH})_x$ -ben a szennyezés hatására jól vezető fázisok keletkeznek, melyek térfogata növekvő szennyező koncentráció hatására nő. A dielektromos állandót a modell keretein belül nem polarizálható hibák, hanem már kis szennyezés koncentrációnál egymással kapcsolatban levő — növekvő szennyezés hatására növekvő nagyságú — fémes felületek kapacitása határozza meg. A dielektromos állandó hőmérsékletfüggését a poliacetilén szálak szennyezett, fémes felületi fázisai okozzák (a szennyezetlen $(\text{CH})_x$ dielektromos állandója *Devereux* [76] szerint hőmérsékletfüggetlen). Belátható ugyanis, hogy a fémes tartományok intrinszc vezetőképességének (ami nyilván nem egyezik meg az anyag makroszkopikus vezetőképességével) növekvő hőmérséklet hatására bekövetkező növekedése (4.23. ábra) határozza meg azt, hogy az elektromos tér milyen mértékben van kiszorítva a fémes tartományokból. A dielektromos állandó növekvő hőmérséklet hatására bekövetkező növekedése így a fémes tartományok vezetőképességének növekedésével kapcsolatos.

A σ_{AC} , illetve σ_{DC} vezetőképességek között tapasztalt diszperzió alapján az éles Mott átalakulás feltételezését (*Chiang* [32]) nem tartjuk megalapozottnak. A vezetőképesség méréseink eredményeit szintén *Tomkiewicz* [35] fázis-szeparáción alapuló modelljének alkalmazásával értelmezzük. Eszerint a $(\text{CH})_x$ egyenáramú vezetőképességét alacsony szennyező koncentráció esetén a jól vezető tartományok kapcsolódása határozza meg. Az erősen szennyezett anyag — jó közelítésben a dópolási koncentrációtól független — vezetőképessége a szennyezett fázisra jellemző. A 9,1 GHz és az egyenáramú vezetőképesség között észlelt diszperzió a jól vezető tartományok laza kapcsolódásának eredménye. (Kiterjedt elektronállapotokon keresztül történő vezetés esetén nem várunk diszperziót.) Méréseink szerint a diszperzió növekvő szennyezés hatására fokozatosan eltűnik. Ez a folyamat teljessé a fémes tartományok összeérése után válik ($y > 0,06$ a $(\text{CH})_x$ rendszer esetén). A vezetőképesség ebben az esetben tisztán fémes jellegű.

A fent elemondottakat összefoglalva a szennyezett poliacetilén elektromos tulajdonságait inhomogén, fémes és szigetelő tartományokat tartalmazó polimer feltételezése alapján magyarázzuk. A szigetelő-fém Mott átalakulás felleptét méréseink nem támasztják alá. Az elektromosan töltött szolitonok feltételezésének elvetése mellett ugyanakkor a szennyezetlen transz poliacetilén paramágnesességét zérus töltésű, feles spinű szolitonoknak tulajdonítjuk, a dolgozatban korábban vázolt értelemben.

Végül megjegyezzük, hogy *Deits* [77] vizsgálta a kémiai úton, 100%-ig dehidroklórozott, jóddal szennyezett PVC egyenáramú vezetőképességét a jó szennyezés függvényében. *Deits* kapott eredményét a jódozott poliacetilén vezetőképességével összehasonlítva a 347. oldalon mutatjuk be. A dehidroklórozott PVC vezetőképessége jódozás hatására öt nagyságrenddel növekedett. A megnövekedett vezetőképesség értéke azonban 5—6 nagyságrenddel elmarad a megfelelő jódozott poliacetilén származékon mért értéktől. Ennek oka a két polimer mátrix szerkezetének különbsége: a poliacetilén kristályos, nagy konjugációs hosszú poliénekből, a dehidroklórozott PVC gél amorf, rövid konjugációs hosszú poliénekből áll.

5. ÖSSZEFOGLALÁS

A dolgozatban ismertetjük a poliacetilént $[(CH)_x]$ alkotó, illetve a degradált poli(vinil klorid) [PVC] láncban található poliénekre és polienil gyökökre vonatkozó vizsgálatainkat. Összehasonlítottuk a két polimer mátrixban levő poliének néhány tulajdonságát analógiák, illetve különbségek felfedése céljából.

A vizsgálatok eredményeit a következőkben foglaljuk össze:

Felvettük különböző módon *degradált PVC optikai spektrumát*. A spektrumból meghatároztuk a *poliének átlagos konjugációs hosszát*. Megállapítottuk, hogy a degradáció során, a lehasadó hidrogénklorid koncentráció függvényében, az átlagos konjugációs hossz csökken és $n=3$ -hoz tart. Összehasonlítottuk a $(CH)_x$, és a degradált PVC optikai spektrumát.

Az *infravörös spektrumok* alapján a *polimerek konfigurációja* (cisz, illetve transz módosulat) azonosítható. Vizsgálataink alapján a degradált PVC-ben keletkező poliének transz módosulatúak. A $(CH)_x$ -ben mindkét izomer forma megtalálható. A cisz-transz arányt az infravörös spektrum felhasználásával határoztuk meg.

A *paramágneses poliéneket* (polienil gyököket) *ESR spektroszkópia* alkalmazásával tanulmányoztuk *mind a degradált PVC, mint a poliacetilén* esetén. A spektrumot alkotó szinglett jel szélességéből következtetéseket vontunk le a polienil gyökök átlagos konjugációs hosszára. *Modell számítások* segítségével megmutattuk, hogy az irodalomból ismert becslés alkalmazásával kapott átlagos hosszak a valódi átlagértékeket felülmúlják. A polienil gyököket az ESR jel szélessége és ezzel összefüggésben a konjugációs hosszuk alapján rendszereztük.

Termikusan degradált PVC ESR vizsgálata során megállapítottuk, hogy a degradáció folyamán a *polienil gyökök hossza nő*, és egy meghatározott határértékhez tart. A degradáció kezdetén a poliének és a polienil gyökök jó közelítéssel azonos hosszúságúak. A párosítatlan spinű elektronok energia minimumát a kezdeti értéknél nagyobb konjugációs hosszhoz tartozó delokalizáció biztosítja. Ezzel magyarázható a gyökök hosszának a degradáció során tapasztalt növekedése. A *diamágneses poliének átlagos hossza* — a polienil gyökökkel ellentétben — optikai méréseink alapján *csökken*; ezt másodlagos kémiai reakciókkal magyarázzuk. Javaslatot teszünk egy, a polienil gyökök *effektív hossz-növekedését eredményező kémiai mechanizmusra*.

A poliacetilén szintézise folyamán cisz módosulatú poliének keletkeznek. Ezzel szemben a polienil gyökök transz módosulatúak. A poliacetilén paramágnesessége tehát (irreverzibilis) cisz-transz izomerizációra utal.

A termikus cisz-transz izomerizáció során a paramágneses polienil szekvenciák száma és hossza egyaránt nő. Megállapítottuk, hogy *az izomerizáció kinetikája az ESR spektrum segítségével közvetlenül nyomon követhető*. Az izomerizáció során kapott transz módosulatú polienil gyökök ESR jelszélessége csökkenő hőmérséklettel nő. Ez lassuló spin diffúzióval hozható kapcsolatba. A spin szuszceptibilitás Curie típusú hőmérsékletfüggést mutat.

Vizsgáltuk különböző cisz-transz tartalmú $(CH)_x$ ESR jelének *telítési jellemzőit*. A transz, illetve levegő hatásának kitett cisz poliacetilén ESR jele — a cisz módosulattal összehasonlítva — nehezebben telíthető. A telítéssel kapcsolatos *relaxációs folyamatokat* — feltételezésünk szerint — elsősorban a *polimerben kötött oxigén határozza meg*. Az ESR jel relatív amplitúdójának és félérték szélességének a mikrohullámú tértől való függése a *jelalak eredetére* vonatkozó információkat is tartalmaz. A rövid polienil gyököket tartalmazó cisz $(CH)_x$ ESR jele a H magok és a paramágneses

centrumok közötti hiperfinom kölcsönhatás következtében *inhomogén módon kiszélesedett*. Növekvő *transz tartalommal* a hiperfinom csatolás csökken, a párosítatlan elektronok diffúziója miatt *mozgási keskenyedés* lép fel.

A *cisz (CH)_x film hengerlése* a polimerben *cisz-transz izomerizációt* idéz elő. A hengerlés izomerizáló hatását a poliacetilén ESR és infravörös spektrumának vizsgálatával követtük. Megállapítottuk, hogy a hengerlés hatására alapvetően a *paramágneses transz szegmensek hossza nő*. Új paramágneses transz szekvenciák a termikus izomerizációval ellentétben nem keletkeznek. Vizsgálataink eredményei arra utalnak, hogy az *izomerizáció* a poliacetilén szénláncon keletkező *polienil gyök jelenlétében* játszódik le. Egy láncmolekulán a cisz-transz szegmenshatárnak a cisz irányba történő irreverzibilis elmozdulását, így a termodinamikailag stabilabb transz lánc kialakulását, a szegmenshatáron kialakuló, párosítatlan spinű elektron teszi energetikailag kedvezővé. A dolgozatban ESR eredményeinkre és irodalmi adatokra alapozva bemutatunk egy, az *izomerizáció mechanizmusára* vonatkozó modellt.

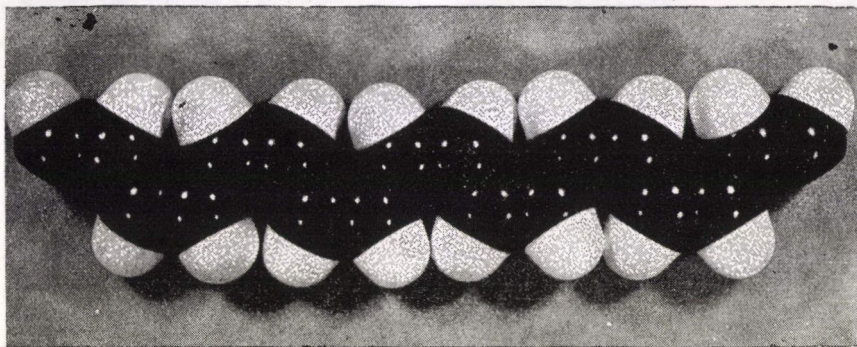
A konjugált kettős kötések tartalmazó polimerek elektromos tulajdonságai intenzív kutatások tárgyát képezik. Megállapítást nyert például, hogy a poliacetilén elektrondonorokkal, illetve akceptorokkal szennyezett módosulatainak elektromos vezetőképessége 12 nagyságrenden belül változtatható, és esetenként a fémes tartományba esik. Az *elektromos tulajdonságok vizsgálata* céljából *jóddal szennyezett poliacetilén* 9,1 GHz mikrohullámú vezetőképességét és dielektromos állandóját határoztuk meg. Az említett paramétereket a *jód szennyezés*, illetve 4% jódatom koncentrációt tartalmazó minta esetén a *hőmérséklet függvényében* mértük. A vezetőképesség növekvő jód koncentráció hatására nő, és egy telítési értékhez tart. A mikrohullámú és egyenáramú vezetőképességek közti diszperziót a növekvő jód szennyezés fokozatosan megszünteti. A dielektromos állandó növekvő hőmérséklet, illetve jód koncentráció hatására szintén nő. A mérések eredményeit *jól vezető, fémes, szennyezett, illetve szigetelő*, szennyezést nem tartalmazó *tartományok szeparációján alapuló modell* segítségével magyarázzuk. A két fázis relatív térfogata, a tartományok kapcsolódásának mértéke és a tartományok intrinszc jellemzőinek hőmérsékletfüggése határozza meg a polimer vizsgált, makroszkopikus elektromos tulajdonságait.

A következőkben néhány ábra segítségével illusztráljuk a vizsgált polimerek tárgyalta tulajdonságait saját eredményeink és részben irodalmi adatok felhasználásával.

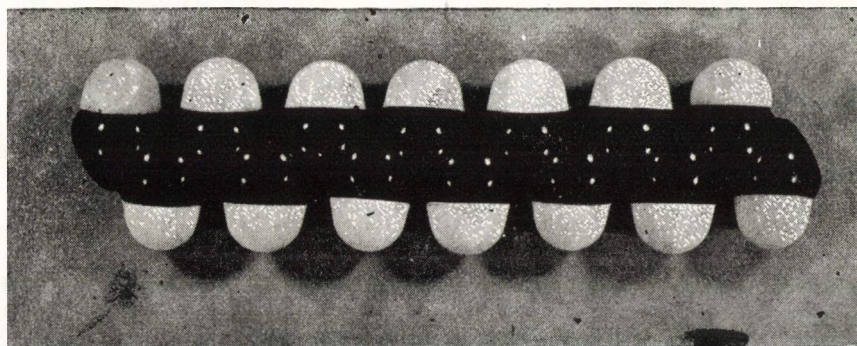
Poliének a degradált PVC-ben és a poliacetilénben:
néhány tulajdonság összehasonlítása

Poliének izomer módosulatai:

cisz



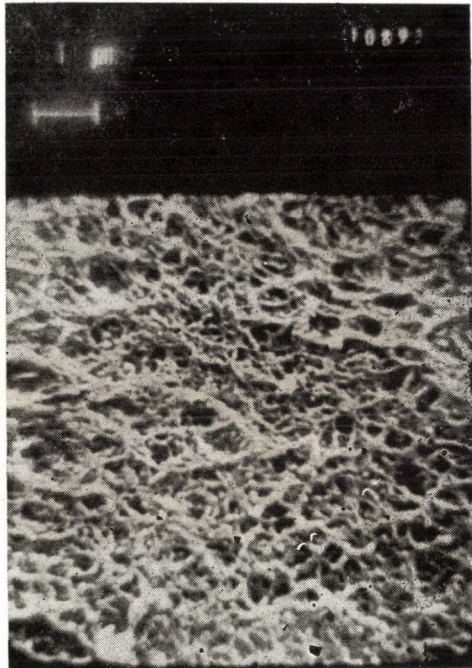
transz



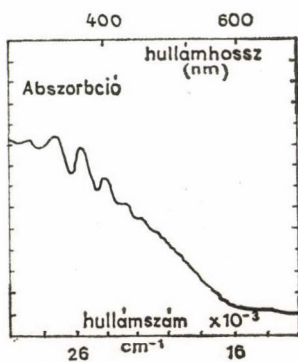
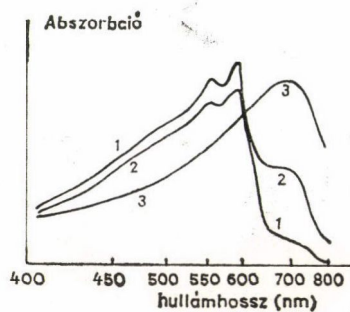
Morfológia



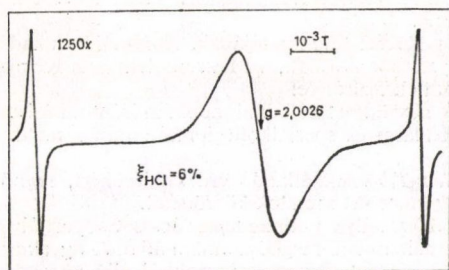
a PVC amorf por



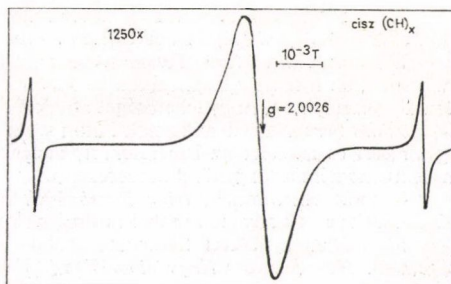
a poliacetilén kristályos szálakból álló film

Elektrongerjesztés ($\pi-\pi^*$ optikai átmenetek)a PVC-ben a rövid konjugáció
hosszú poliének a spektrumban
megkülönböztethetőka poliacetilén nagy konjugációs
hosszú poliénekből áll
(1) — transz (2) — cisz-transz (3) cisz.
A cisz láncan erősebb a π -elektron
lokalizáció, ezért nagyobb
a gerjesztési energia (Shirakawa [10])

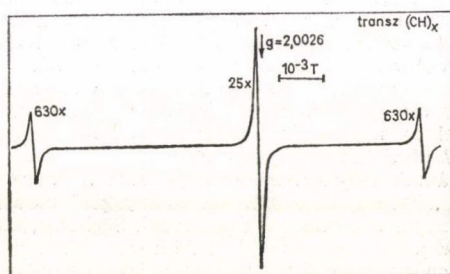
Paramágnesség — ESR spektrum



a PVC-ben lokalizált, transz módosulatú π -fáziskönyök adja az ESR jelet

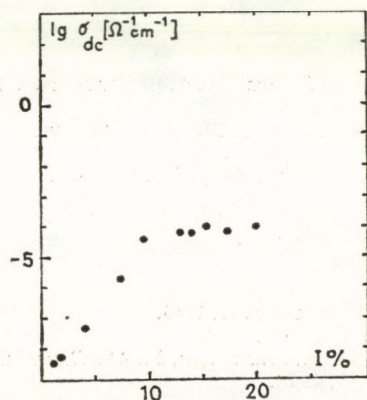


a cisz poliacetilénben kis koncentrációban rövid transz módosulatú paramágneses π -fáziskönyök van

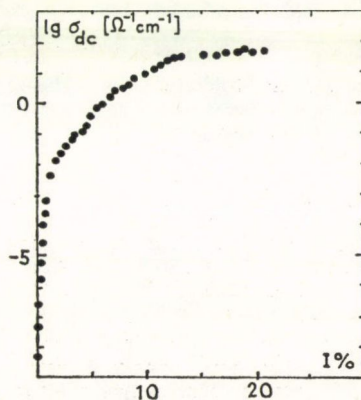


a transz poliacetilénben a nagy konjugációs hosszú láncok mentén mozgékony paramágneses π -fáziskönyök keskeny ESR jelet ad

Egyenáramú vezetés a jód szennyezés függvényében



a degradált PVC amorf, a poliének rövidiek, a telítési σ_{DC} kicsi (Deits [77])



a poliacetilén kristályos, a poliének hosszúak, a telítési σ_{DC} nagy

6. KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Köszönetemet szeretném kifejezni mindazoknak a vezetőimnek, munkatársaimnak és barátaimnak, akik segítségével a dolgozat elkészítését lehetővé tette.

Megköszönöm Márta Ferenc akadémikusnak, a KKKI főigazgatójának, Holló János akadémikusnak, az Intézet igazgatójának és Tüdös Ferenc akadémikusnak, a Makromolekuláris Kémiai Osztály vezetőjének, hogy lehetőséget adtak a dolgozat elkészítésére.

Tüdös Ferenc akadémikusnak külön is szeretnék köszönetet mondani munkám iránt tanúsított figyelméért és azokért az ismeretekért, melyeket előadásai és speciálkollégiumai során a makromolekuláris kémia tárgyköréből szereztem.

Csoportvezetőimnek, Iring Rezsőnének és Kelen Tibornak állandó érdeklődésükért, segítségükért és a kedvező munkakörülmények megteremtéséért mondok köszönetet.

Munkámat a KKKI Makromolekuláris Kémiai Osztálya Polimerdegradációs Csoportjában végeztem. Témavezetőm Nagy Tibor Tamás volt. Kiemeltem kell megköszönnöm állandó figyelmét, mindenre kiterjedő segítségét és azt a nagyfokú szabadságot, amit kémikusokból álló közvetlen környezetemben biztosított számomra. Ez tette lehetővé, hogy megtartsam fizikusi érdeklődésemet és szakmai kapcsolataimat.

A KKKI-ban legszorosabb együttműködésem a Gyökkémiai Csoporttal volt. Vezetőjük, Rockenbauer Antal tanított meg az ESR spektroszkópia elméleti és kísérleti alapjaira, és lehetővé tette, hogy önálló ESR vizsgálatokat végezhessenek. Külön szeretném megköszönni figyelmét, munkám iránti érdeklődését és azt a türelmes segítséget, amit problémáim megoldásakor nyújtott. Köszönöm munkatársának, Győr Miklósnak, hogy feladataim sikeres megoldásához sokszor hozzájárult.

Munkatársaimmal problémáimról számos alkalommal konzultáltam. Ezen beszélgetések során szerzett ismeretekért köszönetet mondok Turcsányi Bélának és Kertész Miklósnak. Egyed Orsolyának és Holly Sándornak az infravörös spektroszkópiai méréseket és a témakörben nyújtott segítségüket köszönöm. A pásztázó elektronmikroszkópos felvételekért Kalló Dénesnének, a PVC por minták besugárzásáért Hardy Gyulánának mondok köszönetet.

A szerves anyagok iránt Jánossy András, diplomamunkám témavezetője keltette fel az érdeklődésemet. Az úgynevezett „alacsony dimenziós szerves anyagok” csoportjába tartozó poliacetilénnel a KFKI-ban, irányítása alatt kezdtem el foglalkozni. Segítsége, tanításai szakmai fejlődésem szempontjából meghatározó jelentőségűek voltak. Külön szeretném megköszönni a doktori disszertációm elkészítése során tanúsított figyelmét, segítségét. Megköszönöm továbbá munkatársainak, a KFKI Szerves Anyagok Osztálya dolgozóinak, személy szerint Holczer Károlynak, Kamarás Katalinnak, Mihály Györgynek, Mihály Lászlónak és Pekker Sándornak a közös munkát, az átadott ismereteket.

A KKKI Polimerdegradációs Csoportja minden dolgozójának köszönöm az együttműködést és a segítségüket. A PVC degradációs kísérletek elvégzésében nyújtott technikai segítségükért Gerber Endrénének és Pula Árpádnának, az ábrák egy részének elkészítéséért Meskó Mónikának mondok köszönetet.

IRODALOM

1. Salem, L.: The Molecular Orbital Theory of Conjugated Systems, W. A. Benjamin, New York—Amsterdam. 1966.
2. Murrel, J. N.: The Theory of the Electronic Spectra of Organic Molecules, Methuen, London 1963.
3. Murrel, J. N., Kettle, S. F. A., Tedder, J.: *M. Valence Theory*, Wiley, London 1965.
4. Kuhn, H. J. *Chem. Phys.* 17, 1198, 1949.
5. Peierls, R. E., *Quantum Theory of Solids*, Calderon, Oxford, 108, 1956.
6. Su, W. P., Schrieffer, J. R., Heeger, A. J., *Phys. Rev. B* 22, 2099, 1980.
7. Kertész M., Surján P., *Solid State Comm.* 39, 611, 1981.
8. Nagy T. T., Kandidátusi értekezés. 1976.
9. Popov, K. R., Szmironov, V. L., *Optika i Spektroszkopija* 14, 787, 1963.
10. Shirakawa, H., Ito, T., Ikeda, S., *Polym. Journal* 4, 460, 1973.
11. Fincher, C. R., Peebles, D. L., Heeger, A. J., Druy, M. A., Matsumura, Y., MacDiarmid, A. G., Shirakawa, H., Ikeda, S., *Solid State Comm.* 27, 489, 1978.
12. Fincher, C. R., Ozaki, M., Tanaka, M., Peebles, D., Lauchlan, L., Heeger, A. J., MacDiarmid, A. G., *Phys. Rev. B* 20, 1589, 1979.
13. Yamabe, T., Tanaka, K., Terama-e, H., Fukui, K., Imamura, A., Shirakawa, H., Ikeda, S., *Solid State Comm.* 29, 329, 1979.

14. Shirakawa, H., Ikeda, S., *Polym. Journal* 2, 231, 1971.
15. Ito, T., Shirakawa, H., Ikeda, S., *J. Pol. Sci. Pol. Chem.* 12, 11, 1974.
16. Shirakawa, H., Ito, T., Ikeda, S., *Makromol. Chem.* 179, 1565, 1978.
17. Ito, T., Shirakawa, H., Ikeda, S., *J. Pol. Sci. Pol. Chem.* 13, 1943, 1975.
18. Ito, T., Shirakawa, H., Ikeda, S., *Kobunshi Robunshu* 33, 339, 1976.
19. Mihály L., Pekker S., Jánossy A., *Synthetic Metals* 1, 349, 1980.
20. Bernier, P. A., Schue, F., Sledz, J., Rolland, M., Giral, L., *Chemica Scripta* 17, 151, 1981.
21. Chien, J. C. W., Karasz, F. E., Wnek, G. E., *Nature*, 285, 380, 1980.
22. Bernier, P., Rolland, M., Linaya, C., Disi, M., *Polymer* 21, 7, 1980.
23. Goldberg, I. B., Crowe, H. R., Newman, P. R., Heeger, A. J., MacDiarmid, A. G., *J. Chem. Phys.* 70, 1132, 1979.
24. Shirakawa, H., Ikeda, S., *Synthetic Metals* 1, 175, 1979/80.
25. Lefrant, S., Rzepka, E., Rolland, M., Aldissi, M., Linaya, C., preprint. 1981.
26. Little, W. A., *Phys. Rev.* A6, 1416, 1964.
27. Keller, H. J., *Low Dimensional Cooperative Phenomena*, Plenum, New York—London 1975.
28. Goodings, E. P., *Chem. Soc. Rev.* 5, 95, 1976.
29. Bechgaard, K., Jacobsen, C. S., Mortensen, K., Pedersen, H. J., Thorup, N., *Solid State Comm.* 33, 1119, 1980.
30. Seanor, D. A. *Adv. Polym. Sci.* 4, 317, Seanor, D. A. in *Polym. Sci.*, ed Jenkins, A. D., North—Holland, 17. fejr. 1975.
31. Blythe, A. R.: *Electrical Properties of Polymers*, Cambridge Univ. Press, London 1977.
32. Chiang, C. K., Fincher, C. R., Park, Y. W., Heeger, A. J., Shirakawa, H., Louis, E. J., Gau, S. C., MacDiarmid, A. G., *Phys. Rev. Lett.* 39, 1098, 1977.
33. Chiang, C. K., Park, Y. W., Heeger, A. J., Shirakawa, H., Louis, E. J., MacDiarmid, A. G., *J. Chem. Phys.* 69, 5098, Chiang, C. K., Gau, S. C., Fincher, C. R., Park, Y. W., MacDiarmid, A. G., Heeger, A. J., *Appl. Phys. Lett.* 33, 18, 1978.
34. Ikehata, S., Kaufer, J., Woerner, T., Pron, A., Druy, M. A., Sivak, A., Heeger, A. J., MacDiarmid, A. G., *Phys.* 1980. *Rev Lett.* 45, 1123, 1980.
35. Tomkiewicz, Y., Schulz, T. D., Broom, H. B., Clarke, T. C., Street, G. B., *Phys. Rev. Lett.* 43, 1532, 1979, Jánossy A., Pogány L., Pekker S., Swietlik R., KFKI, 1981—29.
36. Elias, H. G., *Macromolecules* Vol. 2, 19. fejr., Wiley, New York, 1977.
37. Jellinek, H. H. G., ed., *Aspects of Degradation and Stabilization of Polimers*, Elsevier, Amsterdam. 1978.
38. Ranby, B., Rabek, J. F., *Photodegradation, Photooxidation and Photostabilization of Polymers*, Wiley, New York, 1975.
39. Nass, L. I. (ed.), *Encyclopedia of PVC* 1, 271, Marcel Dekker, 1976.
40. Tüdös F., Kelen T., Nagy T. T., *Developments in Polymer Degradation—2*, ed. Grassie, N., Applied Sci., London, 1979.
42. Tüdös F., Kelen T., Nagy T. T., Turcsányi B., *Pure Appl. Chem.* 38, 201, 1974.
43. Geddes, W. C., *Eur. Polym. J.* 3, 733, 1967.
44. Gupta, V. P., St. Pierre, L. E., *J. Polym. Sci. A—1*, 8, 38, 1970.
45. Braun, D., Bender, R. F., *Eur. Polym. J. Suppl.*, 269, 1969.
41. Scott, G. (ed.), *Developments in Polymer Stabilization —2*, Applied Sci. London, 1980.
46. Kelen T., *J. Macromol. Sci. Chem.* A12, 349, 1978.
47. Kelen T., Iván B., Nagy T. T., Turcsányi B., Tüdös F., *Polym. Bull.* 1, 79, 1978.
48. Kelen T., Nagy T. T., Tüdös F., *React. Kin. Catal. Lett.* 1, 93, 1974.
49. Chang, E. P., Salovey, R., *J. Pol. Sci. Pol. Chem.* 12, 2927, 1974.
50. Nagy T. T., Kelen T., Turcsányi B., Tüdös F., *Polym. Bull.* 2, 77, 1980.
51. Tüdös F., Kelen T., *Macromolecular Chemistry — 8* (Ed. K. Saarela) p. 393. Butterworths, London, 1973.
52. Ohnishi, S. I., Ikeda, Y., Sugimoto, S., Nitta, I., *J. Pol. Sci.* 47, 503, 1960.
53. Ohnishi, S. I., Kashiwagi, M., Ikeda, Y., Nitta, I., *Ind. Use Large Radiation Sources*, Varsó, 1, 291, 1959.
54. Ohnishi, S. I., Nakajima, Y., Nitta, I., *J. Appl. Pol. Sci.* 6, 629, Ohnishi, S. I., *Bull. Chem. Soc. Japan* 35, 254, 1962.
55. Ranby, B., Rabek, J. F., *ESR Spectroscopy in Polymer Research*, Springer, Berlin—Heidelberg—New York. 1977.
56. Anderson, P. W., Weiss, P. R., *Rev. Mod. Phys.* 25, 269, 1953.
57. Nechtschein, M., Devreux, F., Greené R. L., Clarke, T. C., Street, G. B., *Phys. Rev. Lett.* 44, 356, 1980.

58. Abragam, A., The Principles of Nuclear Magnetism, Oxford, IX. fej. 1961.
59. Zbinden, R., Infrared Spectroscopy of High Polymers, Academic Press, London, 1964.
60. Schurz, J., Bayzer, H., Stübchen, H., Makromol. Chem. 23, 152, 1957.
61. Narita, S., Ichihose, S., Enomoto, S., J. Pol. Sci. 37, 281, 1959.
62. Tasumi, M., Shimanouchi, T., Spect. Acta 17, 731, 1961.
63. Shimanouchi, T., Tasumi, M., Bull. Chem. Soc. Japan 34, 359, 1961.
64. Yamabe, T., Tanaka, K., Terama-e, H., Fukui, K., Shirakawa, H., Ikeda, S., Synthetic Metals 1, 321, 1979/80.
65. Hsu S. L., Signorelli A. J., Pez, G. P., Baughman, R. H., J. Chem. Phys. 69, 106, 1978.
66. Baughman, R. H., Hsu S. L., Pez, G. P., Signorelli A. J., J. Chem. Phys. 68, 5405, 1978.
67. Buravov, L. I., Segolev, I. F., Prib. i Tekh. Eksper. 2, 171, 1971.
68. Holczér K.: doktori értekezés, Magyar Fiz. Folyóirat 25, 341, 1977.
69. Hay, J. N., J. Pol. Sci. Part A—1, 8, 1201, 1970.
70. Ouchi, I., J. Pol. Sci. A3, 2685, 1965.
71. Menczel J., Varga J., Juhász K., Binett M., Periodica Politechnica 22, 3, 1978.
72. Kelen T., Bálint G., Galambos G., Tüdős F., Eur. Polym. J. 5, 597, 1969.
73. Poole, P. C., Farrach, H. A., Relaxation in Magnetic Resonance, Academic Press, 1971.
74. Bernier, P., személyes közlés. 1981.
75. Holczér K. 1981, Boucher, J. P., Devreux, F., Nechtschein, M., Phys. Rev. B23, 1051, 1981.
76. Devreux, F., Dörny I., Mihály L., Pekker S., Jánosy A., Kertész M., J. Pol. Sci. Pol. Phys. 19, 743, 1981.
77. Deits, W., Cukor, P., Rubner, M., Organic Coatings and Plastics Chemistry 43, 867, 1980.

ELŐADÁSOK

- Vancsó Gy., ESR Studies in Polycatylene, The International Conference of Low Dimensional Synthetic Metals, Helsinki, 1980. aug. 10—15.
- Vancsó Gy., Nagy T. T., Rockenbauer A., Tüdős F., Polienil gyökök ESR vizsgálata, MTA Spektroszkópiai Munkacsoport ülése, 1981. jan. 29.
- Turcsányi B., Nagy T. T., Iván B., Vancsó Gy., Pukánszky B., Kelen T., Tüdős F., A PVC degradáció és stabilizálás kinetikai és mechanizmus vizsgálatának eredményei, MTA Műanyagkémiai Munkabizottság ülése, 1981. febr. 17—18.
- Vancsó Gy., Pekker S., Jánosy A., Cis-Trans Isomerization of Polycatylene Induced by Mechanical Rolling, Congres de la Societe Francaise de Physique, Clermont-Ferrand, 1981. júni. 29—júli. 4.
- Vancsó Gy., Paramágneses szolitonok poliacetilén és degradált PVC mátrixokban, Szerves Kondenzált Anyagok Szimpózium, Eger, 1981. aug. 31—szept. 5.
- Vancsó Gy., Nagy T. T., Turcsányi B., Czákó E., Tüdős F., Polienil gyökök a PVC degradációjában, Stabinform Kollokvium, 1981. okt. 26—27.
- Vancsó Gy., A poliacetilén felhasználási lehetőségei Szerves Kondenzált Anyagok Szimpózium, Sopron, 1982.
- Vancsó Gy., Nagy T. T., Turcsányi B., Tüdős F., ESR Studies on Degraded PVC, XV. Dolloquium of Danubian Countries, Moszkva 1982. szept. 27—30.
- Vancsó Gy., Nagy T. T., Turcsányi B., Kelen T., Tüdős F., Formation of Fixed Paramagnetic Solitons..., International Conference on the Physics and Chemistry of Conducting Polymers, Bourg St—Maurice 1982. dec. 11—18.

KÖZLEMÉNYEK

- Mihály G., Vancsó G., Pekker S., Jánosy A., Electric Properties of Iodine-Doped Polyacetylene Synthetic Metals, 1, 357, 1979/80.
- Vancsó G., Rockenbauer A., Saturation and Line Width Studies of the ESR Spectra in Polyacetylene, Chemica Scripta 17, 153, 1981.
- Vancsó G., Pekker S., Egyed O., Jánosy A., Cis-Trans Isomerization of Polyacetylene Induced by Mechanical Rolling, KFKI Preprint 1981—50, Polymer, 23, 14, 1982.
- Vancsó G., Nagy T. T., Turcsányi B., Kelen T., Tüdős F., Conjugation Length of Polyenyl Radicals and Polyenes in Thermally Degraded PVC, Makromolekulare Chemie Rapid Communication 3, 527, 1982.
- Vancsó Gy., Nagy T. T., Turcsányi B., Tüdős F., ESR Studies on Degraded PVC, közlés alatt a XV. „Colloquium of Danubian Countries”, konferencia közlemény kötetében.
- Vancsó Gy., Nagy T. T., Turcsányi B., Kelen T., Tüdős F., Formation of Fixed Paramagnetic Solitons..., Journal de Physique C3, supplément au no 6, 44, 701, 1983.

A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó és Nyomda főigazgatója
Műszaki szerkesztő: Sándor István
A kézirat a nyomdába érkezett: 1984. június 11. — Terjedelem 10,15 (A/5) ív
85-2008 — Szegedi Nyomda, Szeged — F. v.: Dobó József igazgató

Ára: 20 Ft
Előfizetés kötetenként: 120 Ft

ISSN 0025—0104

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Györgyi Géza</i> : Káosz diszkrét egydimenziós rendszerekben	235
<i>Vancsó Gyula</i> : Poliének és polienil gyökök néhány fizikai tulajdonságának vizsgálata	291

307.226

7

IV.

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

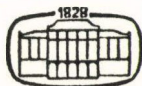
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXXIII. KÖTET

4. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1985

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratról évente egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Turchányi György egyetemi tanár
Biofizikai Intézet
1444 Budapest VII., Postaflók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 120 Ft, Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest, V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215—11 488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218—10 990 útján eszközölhetők).

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

A KÉPLÉKENY ALAKVÁLTOZÁS MECHANIZMUSAI*

Szerkesztő

KOVÁCS ISTVÁN

ELTE, Általános Fizika Tanszék

A jelen cikkgyűjtemény a fémek képlékeny alakváltozási mechanizmusairól ad áttekintést a jelenlegi irodalmi eredmények alapján. A cikkgyűjtemény alapját az ELTE Általános Fizika Tanszék 1983 januárjában tartott négynapos szemináriumának anyaga képi.

* Érkezett 1983. szept. 30.

1. A DISZLOKÁCIÓ SZERKEZET VÁLTOZÁSA FELÜLETEN CENTRÁLT KÖBÖS EGYKRISTÁLYOK ALAKÍTÁSI KEMÉNYEDÉSE SORÁN

UNGÁR TAMÁS

ELTE Általános Fizika Tanszék, Budapest

TARTALOM

1. Bevezetés	353
2. Csúszási geometria fcc kristályokban	356
3. A feszültség-deformáció görbe	357
4. Elektronmikroszkópos megfigyelések	361
4.1. Mikro-plaszticitás	361
4.2. A keményedési görbe I. szakasza	361
4.3. Átmenet az I. és II. szakaszok között	363
4.4. A keményedési görbe II. szakasza	364
4.5. Az alakítási keményedés III. szakasza	373
5. Összefoglalás	375

1. Bevezetés

A fémek képlékeny alakváltozása, valamint az alakítási keményedés mikro-mechanizmusa sok évtizede kutatott és még ma sem teljesen tisztázott problémakör. Mintegy 30 évvel ezelőtt *Cottrell* mutatott rá arra, hogy az alakítási keményedés közel két nagyságrenddel megnövelheti az anyagok (pl. a tiszta réz) szilárdságát [1]. Az azóta eltelt időszakban ez a szilárdságnövekedési hányad egy további nagyságrenddel megnövekedett, részben a próbatest készítés módjának fejlődése, részben pedig a nagyobb tisztaságú anyagok előállítása következtében.

Annak ellenére, hogy az alakítási keményedés mikromechanizmusára vonatkozóan igen nagy számú mérési adat és vizsgálati eredmény áll rendelkezésre, a jelenség magyarázatára még jelenleg is sok egymásnak ellentmondó vagy egymással párhuzamos, de alapfolyamataiban különböző modell létezik. Ennek oka részben abban rejlik, hogy a kísérleti vizsgálatok során, amelyek közül a legegyszerűbb az egytengelyű nyújtás, nagyon sok olyan paraméter és külső körülmény fejt ki lényeges hatást az eredményre, amelyek közül a szerzők legjobb indulatuk ellenére sem veszik figyelembe valamennyit. Csak az egykristály vizsgálatokat szem előtt tartva, néhány ilyen paraméter, illetve körülmény a következő: a próbatest orientációja, az anyag tisztasága, a kiindulási hiba-, illetve diszlokációsűrűség, a próbatest mérete és alakja, a felület és a környezeti atmoszféra minősége, az alakítás hőmérséklete és sebessége, a csúszási rendszerek ismerete (egyszeres vagy többszörös csúszás, illetve túllövés) stb.

Ráadásul a vizsgálatok természetüknél fogva tönkreteszik a próbatestet, tehát nincs lehetőség több mérés elvégzésére ugyanazon a mintán. Lényeges hatása lehet magának a húzóágéknak is a vizsgálat eredményeire. Különösen szembetűnővé válik ez a *Cottrell—Stokes-törvény* vizsgálatakor [2], amelynek egyébként messzemenő

következményei vannak az alakítási keményedés mechanizmusára vonatkozóan, a hasonlósági elv formájában.

Az összes vizsgálati paraméter és körülmény figyelembevétele sem zárhatja ki, hogy az alakítási keményedés mechanizmusának lényegét érintő hatás a vizsgálati módszerek korlátozottsága miatt figyelmen kívül maradjon. Ilyen pl. a hosszú hatótávolságú, makroszkopikus belső feszültségek megjelenése az inhomogén diszlokációsűrűség eloszlás kísérőjeként [3—6]. A makroszkopikus skálán megjelenő belső feszültségek tiszta és egyértelmű felismerése csak a röntgenvonalprofil-analízis korszerű módszerének alkalmazásával vált lehetővé [3, 4].

Az alakítási keményedés mechanizmusára vonatkozóan igen nagy számú elmélet, illetve modell született az első, ún. Taylor-modell [7] óta. Cottrell, 1953-ban megjelent könyvében mintegy 10 különböző elméletet tesz vizsgálat tárgyává [1].

Az alakítási keményedés elméletének alapvetően két különböző dolgot kell megadnia az alakítás függvényében: 1. a diszlokáció sűrűséget és eloszlást a különböző csúszási rendszereken; 2. az alakított kristály mechanikai tulajdonságait az alakítás hőmérsékletének és az alakítás sebességének a függvényében. Első lépésben a folyás-feszültség növekedésére kell magyarázatot adni az alakítás függvényében. A képlékeny alakváltozás minden esetben diszlokáció mozgással jár együtt (itt nem gondolunk a szuperképlékenységre), és az alakváltozást létrehozó feszültség csak úgy növekedhet, ha a mozgásban levő diszlokációkat valamilyen *akadály* a mozgásukban feltartóztatja. Ily módon a diszlokációmozgást megállító *akadály* nélkülözhetetlen eleme a folyás-feszültség növekedési mechanizmusának, és mint ilyen kulcsszerepet játszik minden alakítási keményedési elméletben.

A transzmissziós elektronmikroszkópia (TEM) megjelenése óta (ez mintegy 30 évet tesz ki) szinte minden lehetséges diszlokációelrendeződést megvizsgáltak mind az *akadály*, mind az *akadály* és a mozgó diszlokáció kölcsönhatása szempontjából.

A megértés és az elmélet szempontjából a legrejtélyesebb az alakítási-keményedési görbe II. szakasza. Az erre vonatkozó igen nagy számú elmélet és modell közül lényegében négy alapvetően különböző elmélet maradt fenn a mai napig.

A hosszú hatótávolságú belső feszültségre épülő elmélet szerint a mozgó diszlokációknak az egymagukban elakadt vagy csoportokban feltorlódott diszlokációk („pile-up”-ok) hosszú hatótávolságú feszültségterét kell leküzdeni ahhoz, hogy tovább tudjanak csúszni. Ebben a felfogásban a szekunder diszlokációknak pusztán az a szerepük, hogy a primer diszlokációkat rögzítsék. A primer diszlokációk feltorlódása a hosszú hatótávolságú feszültségtér hatósugarát és amplitúdóját növeli. A folyás-feszültséghez a diszlokációmozgást akadályozó hatások két különböző módon járulnak hozzá. Az egyik a primer diszlokációk között működő hosszú hatótávolságú rugalmas kölcsönhatás járuléka, a szokásos jelöléssel σ_{MOT} , a másik a primer és szekunder diszlokációk metszéséből származó járulék, σ_{COT} . Ezen modellre épülő elmélet részleteit Seeger és munkatársai dolgozták ki [8—12]. Az elmélet egyik alapfeltevése az, hogy egy szokásos szakító vizsgálat során $\sigma_{\text{MOT}} \gg \sigma_{\text{COT}}$.

Seeger és munkatársai elméletét Hazzledin és Hirsch alapos bírálatnak vetették alá [13]. Numerikus módszerek segítségével kiszámították különböző típusú diszlokáció feltorlódások feszültségterének eloszlását és megállapították, hogy még a legkedvezőbb diszlokáció csoportot alapul véve is, a Seeger-modell legfeljebb a folyás-feszültség mintegy 50%-áról tud számot adni.

Egy másik modell szerint a primer diszlokációk mozgását döntően a szekunder diszlokációk akadályozzák. Ebben az elméletben mind a hosszú, mind a rövid ható-

távolságú kölcsönhatások ugyanattól az akadálytól, nevezetesen a szekunder vagy a szokásos elnevezés szerint az „erdő” diszlokációktól származnak [15—17]. Az erdő mechanizmusnak kétségtelenül fontos szerepe van a folyás-feszültség kialakulásában. Azonban, mint látni fogjuk, az alakításkor keletkező diszlokációszerkezet rendkívül inhomogén és bonyolult, ezért a viszonylag leegyszerűsített primer—szekunder diszlokáció kölcsönhatás nem írhatja le egységesen az alakítási keményedést.

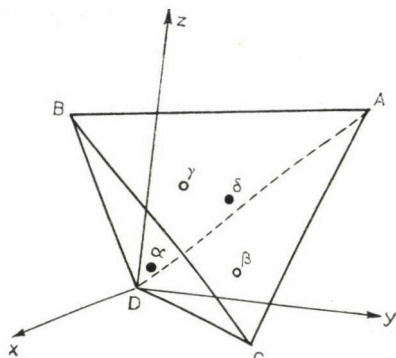
A harmadik típusú elmélet, amely a diszlokációszerkezet egy lényeges vonását ragadja meg, az ún. „hálózsem-hossz”, („mesh-length”) vagy jobb kifejezéssel „szegmens-hossz” elmélet [18—20]. Ezen elméletnek az a kísérleti tapasztalat az alapja, hogy az alakítás mértékével növekszik a diszlokációsűrűség az anyag egész térfogatában. Így a külső feszültség hatására kihajló szegmens szakaszok hossza megrövidül, ami a folyás-feszültség növekedését eredményezi. *Kuhlmann—Wilsdorf* a modell alapgondolatát egész élesen az ún. hasonlósági elvben („principle of similitude”) fogalmazta meg [19]. Ez azt jelenti, hogy a II. szakasz kezdetén kialakuló diszlokáció szerkezet egyszerűen összezsugorodik, geometriai értelemben méretarányos kicsinyítési transzformáción megy keresztül, a külső feszültség és az alakváltozás növekedése során. A hasonlósági elv tehát figyelmen kívül hagyja a szomszédos diszlokációk rugalmas kölcsönhatásában beálló esetleges változásokat attól függően, hogy a kiszemelt diszlokációk éppen milyen elrendezésben vannak. A hasonlósági elv szerint egy diszlokáció elrendeződés teherbírása csak a diszlokációsűrűségtől függ. A legújabb kísérleti tapasztalatok ezt messzemenően nem támasztják alá [3, 4].

A hosszú hatótávolságú belső feszültségekre és az erdő diszlokációkra épülő modellek abban az időben keletkeztek, amikor még nem léteztek TEM-os megfigyelések. Ezt a tényt figyelembe véve a teljesítőképességük és horderejük meglepően nagy. A TEM-os vizsgálatok megjelenése után, amelyeknek a megalapozásában *Hirsch és munkatársainak* döntő szerepük volt [21], *Hirsch és Mitchell* olyan elméletet dolgozott ki az alakítási keményedésre, amely az elektronmikroszkópban megfigyelhető diszlokáció szerkezet különböző tulajdonságaiból indul ki. A *Hirsch*-elmélet döntően abban különbözik a többtől, hogy nem tüntet ki egyetlen akadály típust sem, hanem a folyás-feszültség növekedését egyszerre több akadály-típus együttes működésének tulajdonítja. Ilyenek a Frank—Read feszültség, az erdő diszlokációkkal való kölcsönhatás, valamint a feltorlódott diszlokációktól származó és hátrafelé irányuló hosszú hatótávolságú belső feszültségek. Az elmélet szerint valamennyi akadály-típus közös vonása, hogy hozzárendelhető egy átlagos távolság, D , amit a szerzők az ún. módosított diszlokáció torlaszok közötti effektív távolságnak neveznek. A σ folyás-feszültség fordítottan arányos D -vel, függetlenül az akadály típusától. Figyelembe véve még az alakítatlan kristály kritikus csúsztató feszültségét, σ_0 -t, a következő általános összefüggés adódik: $\sigma - \sigma_0 = k/D$, ahol k állandó. Annak a részletei, hogy az egyes akadályozó mechanizmusok milyen mértékben határozzák meg a folyás-feszültséget, nem lényeges az elmélet szempontjából, a döntő csupán az akadály létezésének a feltételezése.

Az imént felsorolt elméletek részletei, továbbá az, hogy a II. szakasz meredeksége, θ_{II} milyen kapcsolatban van az egyes modellek paramétereivel, összefoglalóan megtalálható *Kovács és Zsoldos* könyvében [22].

2. Csúszási geometria fck kristályokban

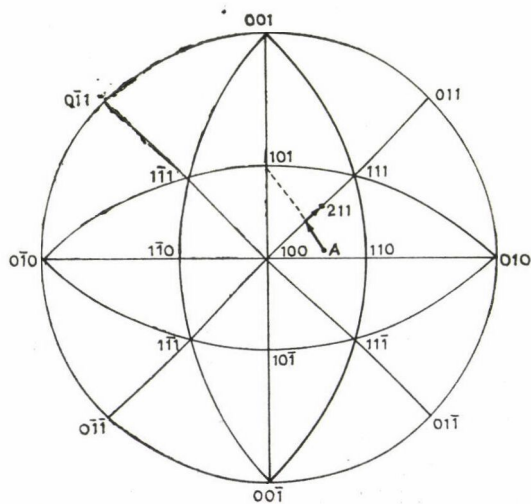
Felületcentrált köbös (fck) szerkezetű anyagok csúszási geometriáját vagy a Thompson-tetraéder, vagy a sztereografikus projekcióval nyert pólusábra segítségével írhatjuk le. A Thompson-tetraéder olyan szabályos tetraéder, melynek az A, B, C és D csúcspontjai rendre az $\frac{1}{2}a$ a (011), $\frac{1}{2}a$ a (101), $\frac{1}{2}a$ a (110) és (000) koordinátájú helyeken vannak, ahol a a rácsállandó (lásd az 1. ábrát) [23]. A csúcspontokkal szem-



1. ábra. Thompson tetraéder. A görög betűk az oldallapok középpontjait jelölik

ben fekvő oldallapok középpontjait jelöljük rendre α, β, γ és δ -val. Ugyanezen oldallapok — jelöljük ezeket a, b, c és d -vel — a kristály négy lehetséges csúszási síkját definiálják, amelyeknek az oldalélei (figyelembe véve a két lehetséges irányt) a lehetséges 12 csúszási irányt adják meg. Mindegyik csúszási irány két csúszó síkhoz tartozik egyszerre, ami 24 lehetséges csúszási rendszert jelent. Egy diszlokáció csúszó parciálisokra való felhasadását például az $AB = A\gamma + \gamma B$ és $AB = A\delta + \delta B$ vektoregyenletekkel jellemezhetjük.

A félgömb sztereografikus vetítésével előállított pólusábrát [22] 24 azonos értékű háromszög alkotja, amelyek mindegyikét az $\{100\}$, $\{110\}$ és $\{111\}$ típusú pólusok



2. ábra. Köbös kristály sztereografikus projekciója, az $[100]$ pólussal a közepén. Az A pont egy középre orientált (ideálisan egyszeres csúszásra) próbatest tengelyének orientációját jelöli

határolják, amint ez a 2. ábrán látható. Egyszerű húzófeszültségnek kitett egykristály húzási tengelyének irányát (vagy egyszerűen tengely-irányát) egyértelműen jellemezhetjük a pólusábrán egyetlen ponttal. Egy kiszemelt háromszög belsejében fekvő valamennyi pontra nézve (vagyis az ilyen tengely-irányokra nézve) ugyanabban a csúszási rendszerben működik a legnagyobb csúsztató vagy nyíró feszültség. Másszóval, a pólusábra 24 háromszögéhez más-más csúszási rendszer tartozik és mivel a csúszási rendszerek száma is 24, a pólusábra háromszögei és a csúszási rendszerek egy-egy értelmű módon felelnek meg egymásnak [24].

Az alapháromszög (v. standard háromszög) csúcsai az (100) (110) és (111) pólusok, a hozzá tartozó csúszási rendszer az $(11\bar{1})$ sík és az $[101]$ irány, vagy a C sík és a DB irány (lásd az 1. és 2. ábrákat). Ha a tengelyirány az alapháromszögben van, akkor ez a *primer* csúszási rendszer és a hozzá tartozó Burgers-vektor $b = \frac{1}{2} a [101]$.

A képlékeny alakváltozás során végbemenő diszlokációmozgás szempontjából további három csúszási rendszernek van fontos szerepe: a *keresztcsúszási* rendszernek, melyet az $(11\bar{1})$ sík és $[101]$ irány, (illetve az a sík és a DB irány), a *konjugált* rendszernek, melyet az $(11\bar{1})$ sík és $[110]$ irány, (illetve a b sík és a DC irány), valamint a kritikus rendszernek, amelyet az (111) sík és az $[10\bar{1}]$ irány, (illetve a d sík és az AC irány) jellemeznek [25].

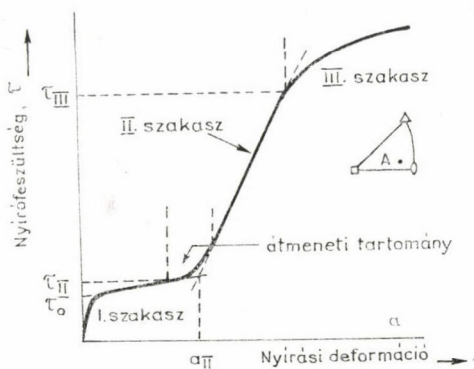
A keresztcsúszási rendszer csúszási iránya megegyezik a primer rendszerével. Ugyanakkor mind a konjugált, mind a kritikus rendszerekben működő nyírófeszültség a primer rendszerben működőhöz hasonlóan magas értékeket érhet el, ugyanis ezek a rendszerek az alapháromszög mellett fekvő ((100), (101) és (111), illetve (100), (110) és $(11\bar{1})$ pólusokkal határolt) háromszögekre nézve a megfelelő primer rendszerek.

A csúszósíkokat alapul véve valamennyi csúszási rendszer besorolható a fenti négy osztályba. Az egy-egy osztályhoz tartozó további két-két csúszási rendszer működését azonban esetenként külön-külön meg kell vizsgálni. Ezen rendszerek működése és a működésük figyelembevétele a latens keményedés vizsgálatokor játszik szerepet [26], ami már túlmegy a jelen dolgozat keretein.

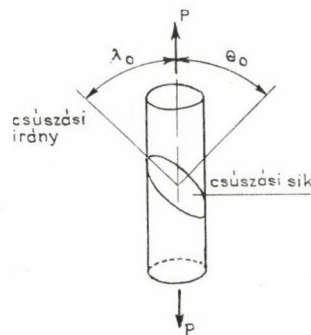
3. A feszültség-deformáció görbe

Az fck szerkezetű kristályok feszültség-deformáció görbéinek általános tulajdonságai, valamint a kristály orientációjától, az alakítás hőmérsékletétől és sebességétől való függése számos összefoglaló dolgozatban megtalálhatók [22, 27–33].

Az alakítási keményedés három fő szakasza az egyszeres csúszásra orientált egykristályokon figyelhető meg a legegyszerűbben (lásd a 3. ábrát). Ilyen kristályorientációt jelöl a 2. ábrán az A pont. Az ettől erősen eltérő vagy a sztetend háromszög csúcspontjaiban orientált próbatesteken az I. szakasz nem különíthető el az alakítási görbén. Az alakítási keményedés mechanizmusának vizsgálata szempontjából az egyszeres csúszásra vagy más néven középre orientált próbatesteknek nagy előnye, hogy miután egyetlen csúszási rendszer aktiválódik, mind a kialakuló diszlokációszerkezet, mind a diszlokáció—diszlokáció kölcsönhatások és reakciók tisztán és egyértelműen tanulmányozhatók.



3. ábra. Egyszeres csúszásra orientált húzófeszültségnek alávetett egykristály feszültség-deformáció görbéje. Az orientációs háromszögbe bejelölt pont a kiindulási tengelyirányítás pólusa. τ_0 a minta folyáshatára, τ_{II} és α_{II} a második szakasz kezdeti folyásfeszültsége és nyírási deformációja, τ_{III} a harmadik szakasz beindulásához tartozó folyásfeszültség



4. ábra. A külső erő a csúszó-sík és a csúszási irány egymáshoz viszonyított helyzete a kristályban

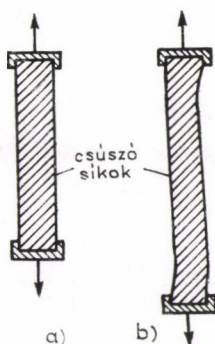
A csúszási síknak, a csúszási iránynak és a kristály orientációjának, ami egyben a húzás iránya is, az egymáshoz viszonyított helyzetét a 4. ábrán láthatjuk. A csúszási síkban a csúszás irányában ható feszültséget a következő egyenlet adja meg [34]:

$$\tau = \frac{P}{q} \cos \lambda_0 \cos \theta_0, \quad (1)$$

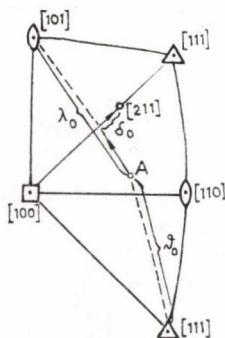
ahol P a húzóerő, q a próbatest keresztmetszete, θ_0 és λ_0 pedig a csúszási sík normálisa, illetve a csúszási irány és a kristály tengelye által bezárt szögek. A külső erőktől származó τ feszültség a csúszási síkban fekvő diszlokációkra ható külső erőt határozza meg, röviden *külső* feszültségnek nevezzük.

τ természeténél fogva nyírófeszültség, amelynek hatására a csúszási síkok elcsúszhatnak egymáson, ráadásul a középre orientált kristályban mindig ugyanabban az irányban. A húzógépfogó pofái ugyanakkor az alakítás során ugyanabban a tengelyben maradnak, ami azt eredményezi, hogy a csúszási síkok az alakítás mértékének növekedésével befordulnak a kristálytengely irányába. Jól látható ez a 5. ábrán, ahol a csúszási síkokat a ferde csíkozás jelképezi.

A csúszási síkok befordulása úgy is megfogalmazható, hogy a kristály orientációja (ami megegyezik a húzás irányával) megváltozik. A kristálytengely mozgását az alakítás során sztereografikus prajekcióban a 6. ábrán láthatjuk. Az A pontban orientált kristályban az $[11\bar{1}]$ csúszási sík és az $[101]$ csúszási irány (a mi esetünkben $\frac{1}{2}$ a $[101]$ Burgers-vektorral) működik. A kristály orientációja akkor ideális az egyszerű csúszás szempontjából, ha az A pont rajta fekszik az $[101]$ és $[11\bar{1}]$ pólusokon átmenő nagykörön. Ilyenkor ugyanis a húzó feszültség, a csúszási sík normálisa és a csúszási irány egy síkban fekszenek és a Schmid-faktor az elérhető legnagyobb értéket



5. ábra. A csúszó-síkok befordulása a húzás irányába a húzási alakváltozás során

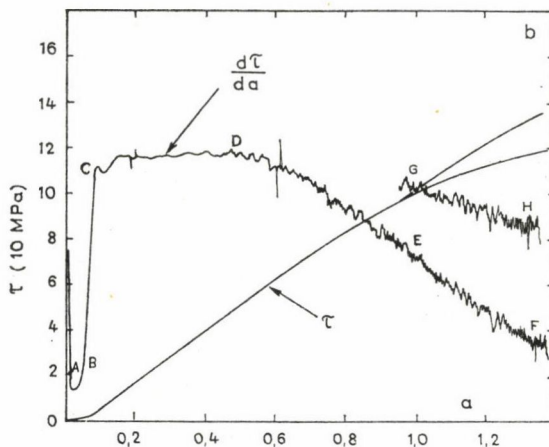


6. ábra. A kristály-tengely (lásd az A pontot a 2. ábrán) mozgása sztereografikus projekcióban az $[101]$ és $[11\bar{1}]$ pólusokat összekötő főkörön

veszi fel a szóban forgó csúszási rendszerben. A kristálytengely mozgása a nyíl irányában történik. Amint a kristálytengely eléri az $[100]$, $[111]$ pólusokkal meghatározott szimmetriatengelyt, a csúszási geometria szempontjából két lehetőség van. A csúsztató feszültség szempontjából a szimmetriatengelyen a konjugált (lásd az előzőekben) és a primer csúszási rendszerek egyenértékűek. Amennyiben az alakváltozás során a konjugált rendszer, a latens keményedés folytán nem vált keményebbé, mint a primer rendszer, úgy a csúszás mindkét rendszerben egyidejűleg folytatódik tovább és ettől kezdve a kristály egyszeres helyett többszörös (jelen esetben kettős) csúszást végez. Ilyen esetben a kristálytengely a szimmetriatengely mentén a $[211]$ pólus irányába mozog (ez utóbbi az $[101]$ és $[110]$ csúszási irányok összegeként adódik).

A másik esetben az történik, hogy a latens keményedés következtében a konjugált rendszer erőteljesebben felkeményedik, mint a primer rendszer és a csúszás a szimmetriatengely elérésekor változatlanul a primer rendszerben folytatódik. Ilyenkor a kristály tengelye változatlanul az $[101]$ — $[11\bar{1}]$ főkörön, az $[101]$ pólus irányába mozog tovább. Ez az ún. *túllövés* jelensége. A primer rendszer további keményedése során elérheti és túllépheti a konjugált rendszerét, aminek következtében a konjugált rendszer elkezd működni és a kristálytengely visszatér a szimmetriatengelyhez. A túllövés jelensége a latens keményedés vizsgálatára ad lehetőséget, ami viszont az alakítási keményedés mechanizmusa szempontjából lehet lényeges.

Annak eldöntése, hogy a középre orientált kristályban a csúszás egyszeres vagy többszörös, egyrészt a harmadik szakasz vizsgálata, másrészt a nyírási deformáció mértékének a meghatározása szempontjából lényeges. Ez utóbbi pedig az alakítási keményedés elméletének a kísérleti eredményekkel való összehasonlításához szükséges. A relatív megnyúlást nyírási deformációra átszámítani nem gond, ha ismerjük a működő csúszási rendszereket [28, 31, 35, 36]. Az viszont, hogy ez mennyire nem magától értetődő feladat, még az oly egyszerű, középre orientált kristály esetében sem, a 7. ábrán látható. Az ábra a nyírófeszültség—nyírási deformáció ($\tau - a$) görbét mutatja egy ideálisan középre orientált Cu egykristály esetében. Az alakítás 77 K-en történt $2 \times 10^{-4} \text{ sec}^{-1}$ sebességgel [26]. Az ábrán a szerzők feltüntették a $d\tau/da$ görbét



7. ábra. Középre orientált nagy tisztaságú Cu keményedési görbéje és a hozzá tartozó keményedési hányad, $d\tau/da$. Az alakítás 77 K-en $2 \times 10^{-4} \text{ sec}^{-1}$ sebességgel történt [26]

is, amit a digitálisan felvett keményedési görbéből numerikus differenciálással nyertek.

A τ – a görbe (kihúzott, sima vonal) jól mutatja a keményedési görbe közismert hármas tagozódását. Az I. vagy könnyű csúszási szakasz rendkívül alacsony nyírófeszültség értékekhez tartozik, mereedsége kicsi és viszonylag rövid alakítási tartomány után befejeződik. Ezt követi a lineáris II. szakasz, majd amikor a keményedési görbe mereedsége csökken, az alakítási keményedés a harmadik szakaszba jut.

Az I. és II. szakaszokat állandó mereedségű tartományok határozzák meg. A $d\tau/da$ derivált-görbe menetéből látható, hogy ez különösen a II. szakaszban teljesül jól, a C és D pontok között viszonylag hosszú, állandónak tekinthető szakasz figyelhető meg. Az első szakasz, a görbe A és B pontok közötti része mindössze egy minimum megjelenésében fejeződik ki. Az E pontban a próbatest orientációja elérte az [100]–[111] pontokkal határolt szimmetriatengelyt. Ettől kezdve az alakváltozás már biztosan többszörös csúszással megy végbe. A többszörös csúszást figyelembe véve az elágazó τ – a görbék közül a felső és a $d\tau/da$ görbék közül a (GH)-val jelölt szakaszok adódnak. A derivált görbe szakadása onnan adódik, hogy a többszörös csúszás megindulásáról azt feltételezzük, hogy ugrásszerűen következnek be. Mind ez a feltevés, mind az E–G szakadás nyilván mesterségesek és nem sok közül van a tényleges folyamathoz. A többszörös csúszás nyilvánvalóan már az E, illetve G pontokhoz tartozó nyírás értékeknél sokkal kisebb alakváltozásoknál beindul és fokozatosan növekszik ennek az aránya a teljes alakváltozásban. Az egyszeres csúszásnak a többszörös csúszásba való átalakulása bonyolult, nem teljesen tisztázott folyamat. Az mindenestre látható, hogy az egyes szakaszok meghatározása és behatárolása óvatosságot igényel.

A keményedési görbék részleteinek a hőmérséklettől, az alakítási sebességtől, valamint a kristály orientációjától való függését számos összefoglaló dolgozatban

megtalálhatjuk [22, 27, 28, 30, 31]. A jelen dolgozatban azt szeretnénk megvizsgálni, hogy azok a megfigyelések, amelyek az alakítás során kialakuló diszlokáció szerkezetekre vonatkoznak, hogyan viszonyulnak az alakítási keményedés különböző elméleteihez.

4. Elektronmikroszkópos megfigyelések

4.1. Mikro-plaszticitás

Nagy tisztaságú (5 N), a szokásos módon és körütekintéssel előállított Cu egykristályban a diszlokációsűrűség mintegy 10^{10} m^{-2} [15]. Hosszú idejű vagy ciklikus hőkezelésekkel elérhetők 10^8 vagy $5 \times 10^7 \text{ m}^{-2}$ értékek is [15, 37, 38]. Az ilyen anyagokban a kristállyal együtt növekedett diszlokációknak mindössze 1/10-e csoportosul szubhatárokon, a döntő többségük egyenletesen tölti ki a kristály térfogatát. Amint a feszültség megközelíti a folyáshatárt, a diszlokációknak egyre növekvő hányada elkezd mozogni. A folyáshatárnál a térfogati diszlokációknak mintegy 75 %-a elmozdul [39]. Az alakváltozásnak ezt a módját mikro-folyásnak vagy mikro-plaszticitásnak nevezzük.

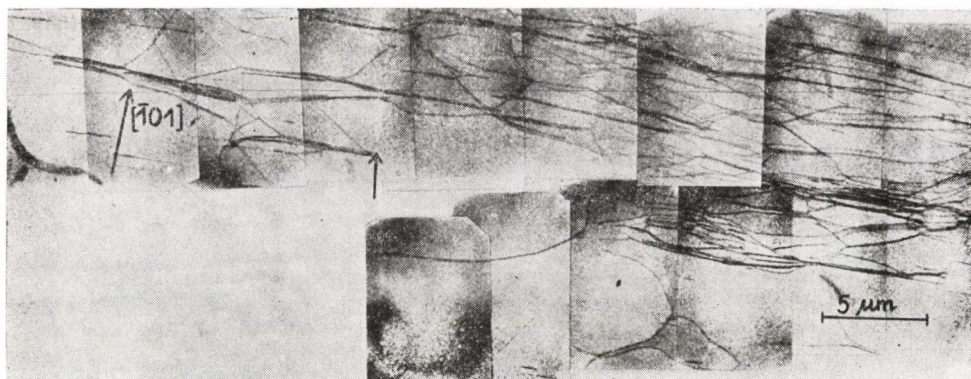
Ebben a tartományban még alig figyelhető meg makroszkopikus alakváltozás, amellet, hogy a diszlokációsűrűség meghússzorozódhat [38]. Cu egykristályok esetén az I. szakasz általában akkor indul be, amikor a diszlokációsűrűség eléri a 10^{10} m^{-2} . Ez a viszonylag általános szabály érvényes mind az olyan próbatestekre, amelyekben a kiindulási diszlokációsűrűség ennél kisebb, mind pedig a különböző orientációjú kristályok esetén [15].

Maratásos megfigyelések azt mutatták, hogy a mikroplaszticitás tartományában a mozgó diszlokációk feltorlódnak a szubhatárok mentén, ugyanakkor ezek, az alacsony feszültségeken keletkezett feltorlódások könnyen relaxálódtak a visszaterhelés után [39].

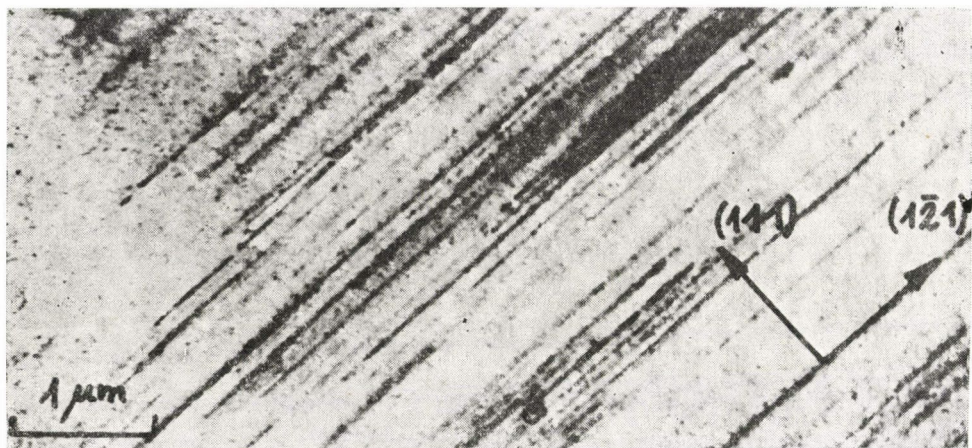
4.2. A keményedési görbe I. szakasza

A 8. ábra a primer csúszósík TEM képét mutatja (a fólia síkja párhuzamos a primer csúszósíkkal) $a=0,055$ nyírási deformációig alakított, középre orientált Cu egykristályra [40]. A képen látható háttér pontozottságot (különösen az ábra közepén látható) a leterhelés után alkalmazott, a fóliavékonyítást megelőző erős neutron besugárzás okozta. Ennek célja a térfogati diszlokációszerkezet rögzítése volt. Az ábra alapján megállapítható, hogy 1. a diszlokációszerkezet csak él komponenseket tartalmaz, az ábrán az egyik nyíl jelöli a működő Burgers-vektor irányát. Csavardiszlokációk az ábrán nem figyelhetők meg. 2. Visszaterhelt állapotban (erre vonatkozik az ábra) nem figyelhetők meg egyedülálló, kihajlott diszlokációk, ami arra utal, hogy nincsenek hosszú hatótávolságú mikroszkopikus belső feszültségek.

A 9. ábra a csúszás irányára merőleges metszet TEM-képét mutatja (a fólia síkja merőleges az [101] irányra). A diszlokációk az ún. merőleges kontraszt alapján láthatók, ami természeténél fogva széles [21]. A viszonylag alacsony diszlokációsűrűség miatt azonban a felbontóképesség elegendően nagy ahhoz, hogy a következő megállapításokat tegyük. 3. A megfigyelhető éldiszlokációk kizárólag a jól meghatározott primer csúszósíkban fekszenek. 4. Az előző ábrával összehangban, nem találunk



8. ábra. Középre orientált Cu egykristály primer csúszósíkjának (a fólia síkja párhuzamos a primer csúszósíkkal) TEM képe. Az alakítás 4,2 K-en 1,3 MPa nyírófeszültségig (I. szakasz) történt [43]



9. ábra. Középre orientált, 78 K-en az I. szakaszba, 1,4 MPa nyírófeszültségig alakított Cu egykristály TEM képe. A fólia síkja merőleges a primer csúszás irányára [43]

kusza diszlokáció kötegeket (gubancokat), továbbá a primer csúszási rendszeren kívül semmilyen szekunder rendszer nem vesz részt az alakváltozásban.

Az I. szakaszban összenyomással alakított Cu egykristályokon végzett röntgen topográfias vizsgálatok alapján *Joung és Sherill* [41] megállapították, hogy a neutron besugárzással rögzített terhelt állapotban azonos gyakorisággal fordulnak elő csavar és él diszlokáció komponensek. A neutron besugárzás nélkül visszaterhelt mintákon csavar komponensek nem voltak megfigyelhetők, az előzőekkel teljes összhangban.

Az I. szakaszban tehát az alakváltozás a primer csúszási rendszerben kitáguló diszlokáció hurkok révén megy végbe. A visszaterhelés után az ellentétes Burgers vektorú hurkok dipólokká relaxálódnak. A dipólok él komponensei jól megfigyelhe-

tők a TEM felvételeken (lásd a 8. és 9. ábrákat), ugyanakkor a csavarkomponensek keresztcsúszással kioltják egymást.

Fontos megjegyezni, hogy ez a keresztcsúszás *nem* azonos a III. szakasz beindulásakor megfigyelhető és a III. szakaszra jellemző, termikusan aktivált keresztcsúszással.

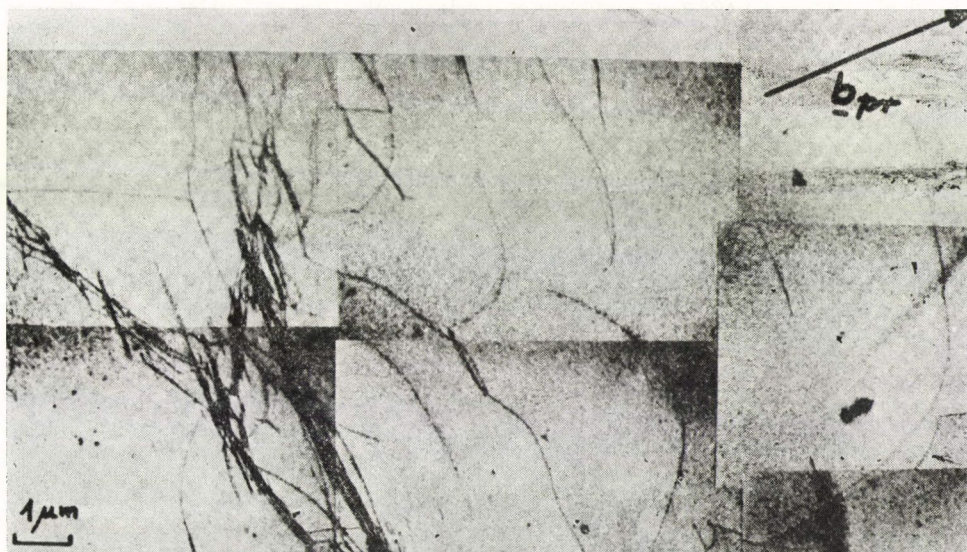
4.3. Átmenet az I. és II. szakasz között

Az I. szakasz vége és a II. szakasz beindulása közötti, ún. átmeneti tartomány, amely a 7. ábrán a B és C pontok közötti szakasznak felel meg, érdekes tulajdonságokat mutat az alakítási keményedés mechanizmusa és az ezzel kapcsolatos különböző elméletek szempontjából.

A diszlokáció-sűrűség ebben a tartományban még viszonylag kicsi, ezért a TEM-pal jól vizsgálható. A röntgendiffrakciós Berg—Barrett-módszerrel az egyes diszlokációk már nem képezhetők le, viszont a nagyobb kristálytartományok elfordulása a nem kompenzált diszlokációk feltorlódása miatt ezzel az eljárással jól megfigyelhető [42].

A felületi vizsgálatok azt mutatják, hogy a csúszásvonalak rövidebbek és sűrűbbek lesznek, mint az alacsonyabb mértékű alakításoknál, de a sűrűségük még mindig egyenletes és csak elvétve tapasztalhatók keresztcsúszási sávok [43].

A 10. ábra középre orientált Cu egykristály TEM képét mutatja. Az alakítás 293 K-en, $a=0,076$ nyírási deformációig történt. A fólia síkja párhuzamos a primer csúszósíkkal. Az I. szakaszra is jellemző feltorlódások mellett bőven előfordulnak hosszú, egyedülálló, kihajlott diszlokációs szakaszok, elsősorban élkomponensekkel.



10. ábra. Középre orientált, 293 K-en 1,4 MPa nyírófeszítéssel az átmeneti tartományba alakított Cu egykristály TEM képe. A fólia síkja párhuzamos a primer csúszósíkkal [44]

A diszlokációk neutronokkal való rögzítése a visszaterhelés után, a fóliavékonyítás előtt történt [44]. Megjelennek tehát a hosszú hatótávolságú belső feszültségek, amelyek a primer és szekunder diszlokációk kölcsönhatása szempontjából is lényegesek [43]. Az átmeneti szakasz tulajdonságait a következőkben foglalhatjuk össze:

1. A csúszás, az I. szakaszhoz hasonlóan, csak a primer csúszási rendszerben megy végbe.

2. A szekunder rendszerekben is megjelennek diszlokációk, jelentős mozgás nélkül. Ugyanakkor a primer és szekunder diszlokációk közötti kölcsönhatás révén olyan 2 dimenziós rácsok, illetve hálók alakulnak ki, amelyek egyrészt párhuzamosak a primer csúszási síkokkal, másrészt az egymással szomszédos hálók ellentétes irányú rácselfordulást hoznak létre (a szomszédos hálókban egymás mellé kerülő diszlokációk Burgers-vektorai ellentétes előjelűek), amelyek Berg—Barrett felvételeken megfigyelhetők. A diszlokáció hálók elemei igen gyakran Lomer—Cottrell-akadályok, hasonlóan a II. szakaszhoz.

3. Mint már említettük, megjelennek a hosszú hatótávolságú belső feszültségek, amelyeknek az értéke azonos nagyságú vagy kb. fele az alkalmazott külső feszültségnek.

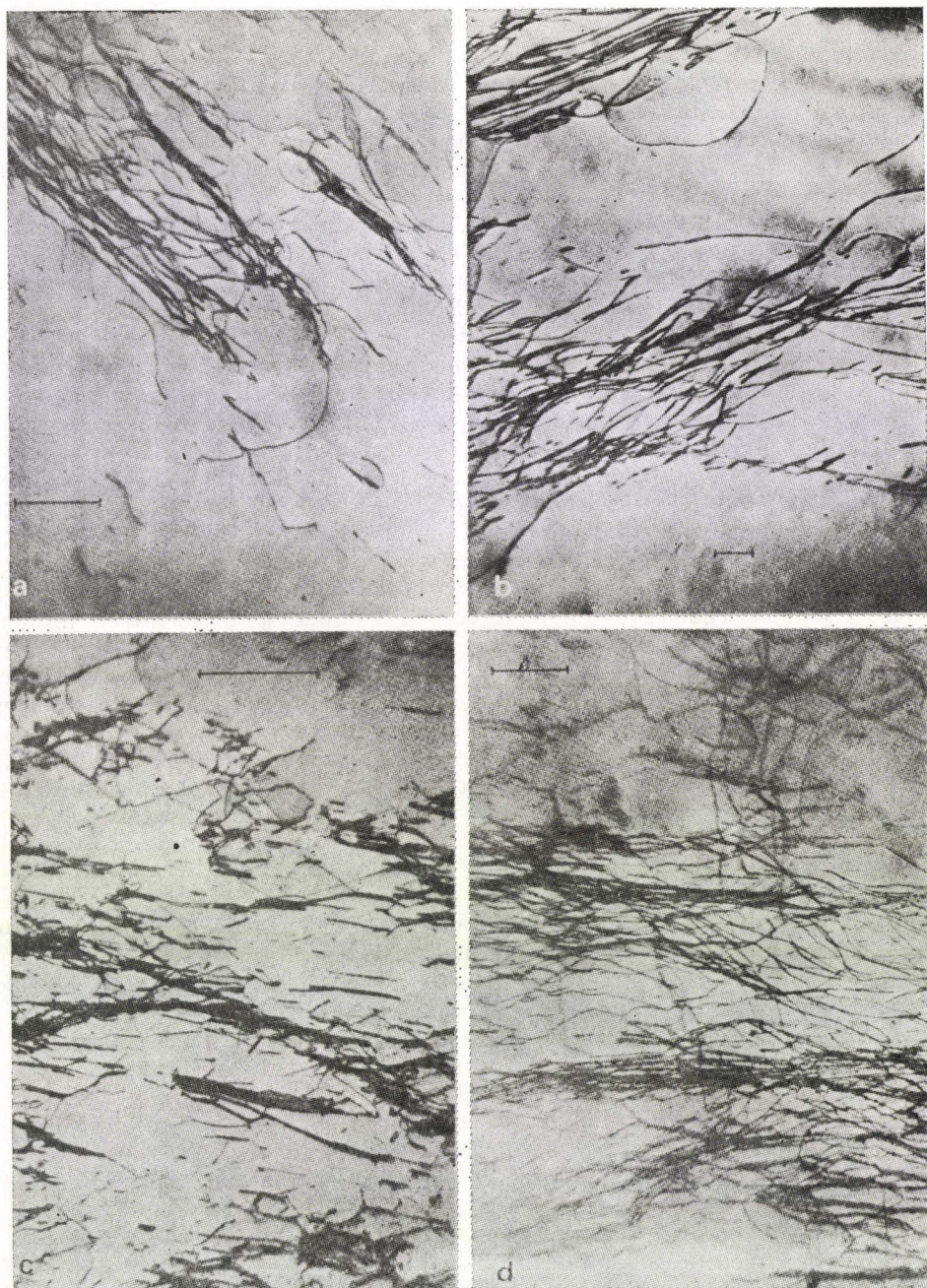
Mindezek a megfigyelések alátámasztják *Seeger és munkatársainak* [8, 9, 43] az I. szakasz befejeződésére vonatkozó modelljét, amelynek lényege a következő. Az I. szakasz akkor ér véget, amikor a primer rendszerben a folyás-feszültség olyan nagy lesz, hogy a szekunder rendszerekben működő nyíró feszültség az alakítás során bekövetkezett latens keményedés mellett is elegendően nagy értéket ér el a szekunder csúszás megindulásához. A szekunder csúszás következtében, a primer—szekunder diszlokációk reakciója révén Lomer—Cottrell-akadályok képződnek, amelyek mentén a primer diszlokációk elakadnak és feltorlódnak. Ennek hatására τ erőteljesebben növekedni kezd és megkezdődik az alakítási keményedés II. szakasza.

Ebben az értelmezésben a szekunder diszlokációk csupán „katalizálják” a primer rendszerben való csúszás elakadását és nem közvetlenül akadályozzák a primer diszlokációk mozgását. A szekunder diszlokációk közvetlen akadályozó hatása az erdő mechanizmus [15—17], amely szerint a szekunder diszlokációk mozgását a primer—szekunder diszlokációk közötti hosszú hatótávolságú kölcsönhatás aktiválja, ugyanakkor a primer diszlokációk elakadását a szekunder diszlokációkkal való metszés, tehát rövid hatótávolságú kölcsönhatás okozza. Ez utóbbi szerint a Lomer—Cottrell-akadályok keletkezése egyrészt csak egy része a primer—szekunder diszlokáció reakcióknak, másrészt csupán következménye a primer diszlokációk erdőn való áthaladásának.

Nyilvánvaló, hogy ha már vannak szekunder diszlokációk, akkor mind a katalitikus, mind az erdő mechanizmus működni fog. A primer diszlokációk mozgását a szekunder diszlokációk akadályozzák mind a rögzült diszlokációk keletkezése, mind pedig az átmetszés révén. A kérdés csak az lehet, hogy az egyes mechanizmusok milyen arányban járulnak hozzá τ növekedéséhez.

4.4. A keményedési görbe II. szakasza

Az alakítási keményedés II. szakaszában játszódik le a folyásfeszültség növekedésének mintegy 70—80%-a, a diszlokációszerkezet mind a sűrűség, mind az elrendeződés szempontjából rendkívül változatos képet mutat. Ugyanakkor a keményedési görbe meredeksége, θ_{II} , a legtöbb mellékfeltételtől gyakorlatilag függetlenül, közel



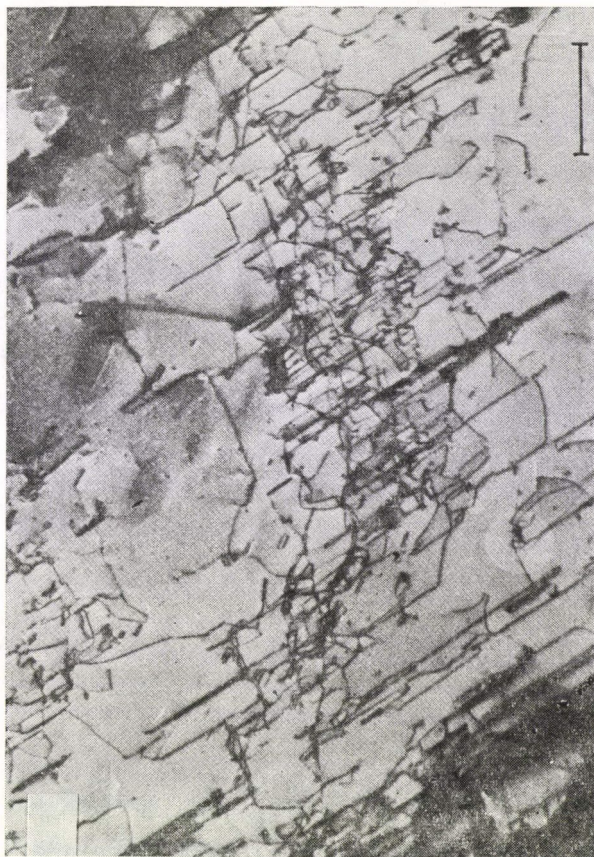
11. ábra. Középre orientált, 4,2 K-en 7 MPa (a), illetve 12 MPa (c) nyírófeszültséggel a II. szakasz elejéig, illetve közepéig alakított Cu egykristály és hasonló orientációjú 793 K-en a II. szakasz elejéig (b), illetve közepéig (d) alakított Ge TEM képe. A fólia síkja párhuzamos a primer csúszósíkkal. A képen látható jelek 1 μm -t jelölnek [26]

$\mu/300$ értéket vesz fel, ahol μ a nyírási modulusz. A mikroszkopikus szempontból oly sokszínű, ugyanakkor a fenomenologikus oldaláról oly egyszerű viselkedés magyarázza azt, hogy a II. szakasz a képlékeny alakváltozásnak talán a legkiterjedtebben megvizsgált területe. Első lépésben röviden áttekintjük a diszlokációs szerkezettel kapcsolatos alapvető TEM vizsgálatok eredményeit, majd ezt követően összefoglaljuk azokat a következtetéseket, amelyek az alakítási keményedési elméletek szempontjából a leglényegesebbek.

A 11. ábra középre orientált Cu (a, c), illetve hasonlóan orientált Ge (b, d) egykristályok primer csúszási síkjainak TEM képét mutatja a II. szakasz kezdeti részéig (a, b), illetve kissé erősebb alakítás (c, d) után. A 11a. ábrán az I. szakaszra is jellemző, csupán nagyobb sűrűségű és rövidebb, éldiszlokációkból álló dipólköteg figyelhető meg (lásd 8. ábrát is). A primer Burgers-vektor a kötegben fekvő diszlokációkra merőleges. A köteg szélén nagy ívben kihajló csavardiszlokáció jelentős hosszú hatótávolságú belső feszültségekről tanúskodik. Ez új jelenség az I. szakaszhoz képest. A 11b. ábra hasonlóan alakított Ge egykristály TEM képét mutatja a primer csúszósíkról [45]. A két ábra szembevető hasonlósága azt mutatja, hogy a neutron sugárzással nem rögzített Cu-mintából gyakorlatilag nem tűnnek el a diszlokációk, mint azt korábban sok szerző feltételezte [46]. A 11c. ábra kissé erősebben alakított Cu-minta primer síkját mutatja (az alakítás 4,2 K-en 12 MPa nyírófeszültséggel történt). A dipólkötegekben a diszlokációs sűrűség igen nagy és megfigyelhető, hogy a szekunder csúszósíkokban való aktív csúszás és az azt követő primer—szekunder diszlokáció reakciók következtében egyes dipólkötegek vége le van „csapva”. Ez a mechanizmus a dipólkötegek általános megrövidüléséhez vezet. A 11d. ábrán ismét Ge egykristálynak, az előzőhöz hasonló képe látható [45]. A sűrűbb és rövidebb dipólkötegek teljesen hasonló képet mutatnak, mint Cu esetében a 11c. ábrán. A Ge csak mintegy 1000 K körüli hőmérsékleten válik plasztikussá, így az ezen hőmérsékleten alakított, majd szobahőmérsékletre hűtött mintákban a diszlokációk nem tudnak elmozdulni, hasonlóan a neutron besugárzással rögzített rézhez. A neutronokkal *nem* besugárzott és a hasonló módon alakított Ge kristályok megegyező diszlokációs szerkezete, mint már említettük, arra utal, hogy a Cu mintákból nem tűnnek el a diszlokációk a visszaterhelés és a fóliavékonyítás során.

A 12. ábra ugyancsak a II. szakasz elejéig alakított (4,2 K-en, 10,8 MPa-lal) Cu minta primer síkjának TEM képét mutatja. Az egyenes diszlokáció szakaszok a primer-konjugált, illetve primer-kritikus rendszerekben mozgó diszlokációk reakciójaként létrejött Lomer—Cottrell-akadályok. A 13. ábra ugyancsak 4,2 K-en, hasonló feszültséggel alakított Cu minta primer síkját mutatja. Ez utóbbi ábrán látható, hogy a Lomer—Cottrell szakaszok a primer csúszósíkkal párhuzamosan kiterülő hálót alkotnak. Az ábrán feltüntetett primer Burgers-vektor a hálószemek átlóival párhuzamos, összhangban azzal, hogy a Lomer—Cottrell szakaszok a primer-konjugált, illetve a primer-kritikus síkok metszésvonaláiban fekszenek. Az ábra jobb felső sarkában jól megfigyelhetők a dipólkötegek, amelyeknek iránya merőleges a primer Burgers-vektorra, mivel a dipólok csak él komponenseket tartalmaznak. Mind a 11. és 12., mind pedig a 13. ábra azt mutatják, hogy a b_{pr} -re (primer Burgers-vektorra) merőleges dipólkötegek, illetve a Lomer—Cottrell hálók a II. szakasz elején, a kristályban egymás mellett, váltakozva alakulnak ki.

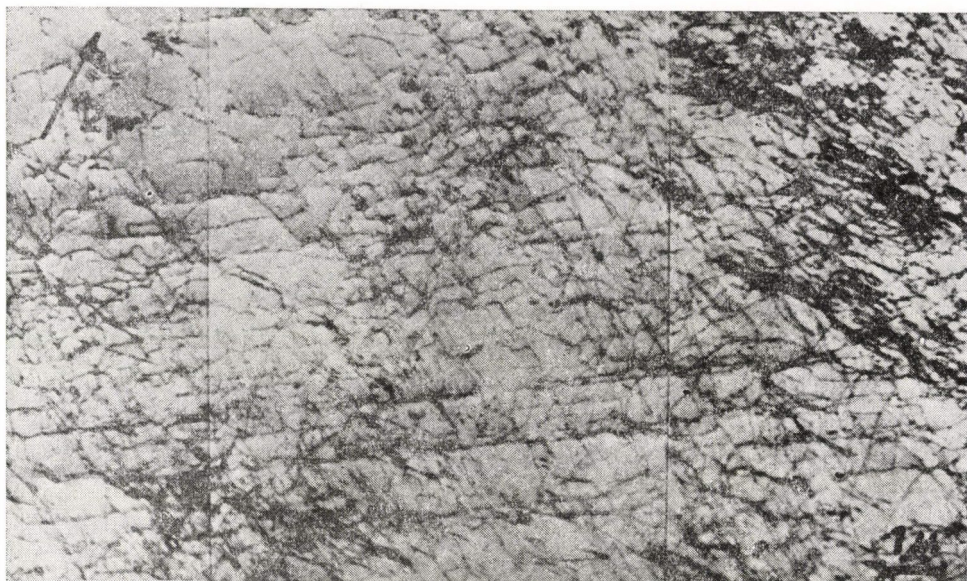
A hálók és a kötegek előlnézeti képe a 14. ábrán látható [46]. A TEM fólia síkja merőleges a primer csúszás irányára. Az ábrán a D-vel jelölt terület környezetében, a diszlokációk diffúz, merőleges kontrasztja látható (lásd 9. ábrát is), ami primer disz-



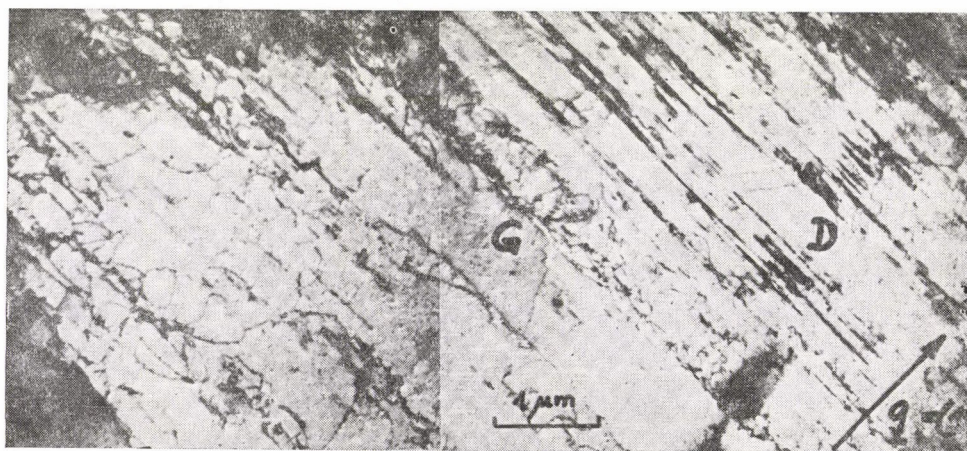
12. ábra. Lomer—Cottrell háló, középre orientált, 4,2 K-en a II. szakasz elejéig ($\tau=10,8$ MPa) alakított Cu egykristályban. A fólia síkja párhuzamos a primer csúszósíkkal. Az ábrán látható jel 1 μm -t jelöl [26]

lokációktól származik. Ezek tehát a dipólkötegek kontrasztjai előlnézetben. A G-vel jelölt területen éles kontrasztok láthatók. Ezek a primer—szekunder reakciókból keletkezett Lomer—Cottrell szakaszok kontrasztjai. A Lomer—Cottrell szakaszokból álló hálók is a primer csúszósíkkal párhuzamos keskeny rétegekben fekszenek és az egyes rétegeket csak néhány diszlokáció köti össze egymással. A kép bal alsó sarkában kontraszton kívüli tartományt láthatunk, amelynek a határa párhuzamos a primer csúszósíkkal. A következőkben erre a jelenségre visszatérünk.

A II. szakasz középső és magasabb tartományába alakított minták TEM képét mutatják a 15—17. ábrák [26, 46]. A 15. ábrán a primer csúszósík TEM képe látható. Megfigyelhető az egymással mintegy 60° -os szöget bezáró kitüntetett irányítottság, ami annak felel meg, hogy a Lomer—Cottrell szakaszok a primer-konjugált és a primer-kritikus síkok metszésében fekszenek. A 15a. ábrán az összes primer diszlokáció látható. A 15b. ábra olyan reflexióval készült, amellyel a szekunder komponens



13. ábra. Lomer—Cottrell háló, középre orientált, 4,2 K-en a II. szakaszba ($\tau=16,5$ MPa) alakított Cu egykristályban. A fólia síkja párhuzamos a primer csúszósíkkal [46]



14. ábra. Középre orientált 4,2 K-en a II. szakaszba ($\tau=16,5$ MPa) alakított Cu egykristály TEM képe. A fólia síkja merőleges a primer csúszás irányára [46]



15. ábra. Lomer—Cottrell háló TEM képe középre orientált, 4,2 K-en a II. szakasz végéig ($\tau = 38$ MPa) alakított Cu egykristályban. A fólia síkja párhuzamos a primer csúszósíkkal. Az (a) ábrán valamennyi primer és $L-C$ diszlokáció látható,

tartalmazó Lomer—Cottrell szakaszok nem láthatók. Szembetűnő a diszlokációs-sűrűség jelentős csökkenése.

A 16. ábra a hálószerkezet oldalnézeti képét mutatja, azaz a fólia síkja merőleges a primer csúszósíkra és párhuzamos a primer Burgers-vektorral. A sötét, tömör, b_{pr} -el párhuzamos kontrasztok a hálók oldalnézeti képei. Ezek tehát viszonylag vékony, de véges vastagságú lemezes szerkezetű diszlokáció hálók, igen nagy diszlokációs-sűrűséggel. A hálókat helyenként a keresztcsúszási síkokban fekvő primer és szekunder diszlokációkból álló fonatok vagy falak kötik össze. A hálók között gyakran találunk nagyobb, összefüggő, alacsony diszlokációs-sűrűségű tartományokat, ún. cellákat.

A 17. ábrán egymás mellett láthatjuk a döntően hálókból (a), illetve kötegekből (b) felépített tartományok előlnézeti képét. Mindkét ábrán a fólia síkja merőleges a



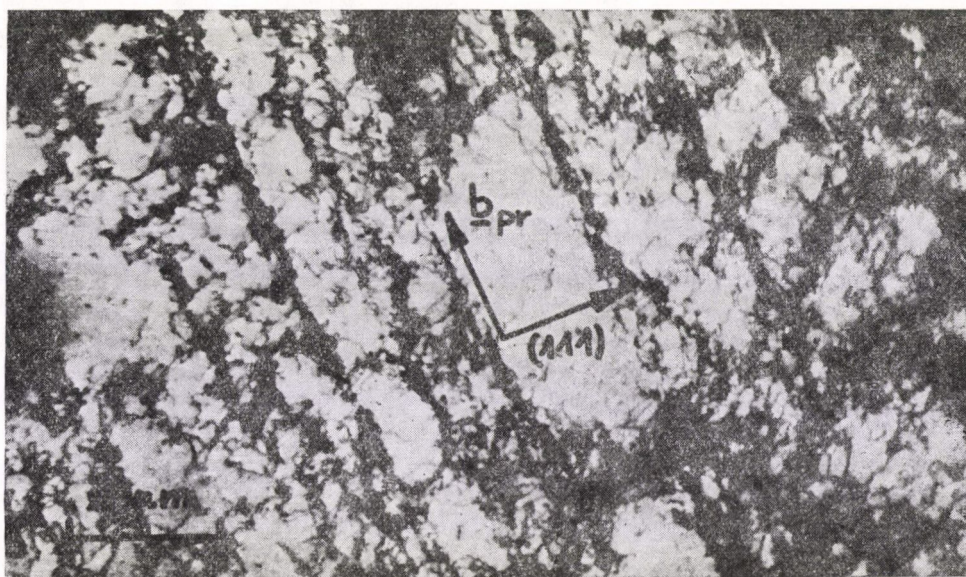
15. ábra.

a (b) ábrán a primer és $L-C$ szakaszok nem adnak kontrasztot [26]

primer csúszás irányára és a kitüntetett irányítottság megegyezik a primer csúszósík irányával. A 17a. ábrán egymást váltják a kontrasztban, illetve kontraszton kívül levő rétegek. Az egyes rétegeket Lomer—Cottrell szakaszokból álló hálók választják el egymástól. Az egymás mellé kerülő háló elemek Burgers-vektorai páronként kompenzálják egymást és nyírási elfordulást hoznak létre. A 17b. ábrán a dipólkötegek merőleges kontrasztját láthatjuk, hasonlóan a 14. ábrához. Az ábra jobb felső sarkában a köteges tartományt felváltja a hálós szerkezet, amit a sötét kontraszt megjelenése jelez.

A különböző hőmérsékleteken végzett vizsgálatok azt mutatták, hogy a hálós és köteges tartományok térfogati aránya hőmérsékletfüggő, a hőmérséklet növekedésével növekszik a dipólkötegek térfogati aránya [26].

A 18. ábra a különböző metszetekből összeállított montázst ábrázol [26]. Az előzőekben áttekintett 8—17. ábrák a következőképpen kapcsolódnak a montázs egyes



16. ábra. A II. szakasz végéig ($\tau = 44$ MPa) 4,2 K-en alakított, középre orientált Cu egykristály TEM képe. A fólia síkja merőleges a primer csúszósíkra és párhuzamos a primer csúszás irányával (oldalnézet) [44]

oldalaihoz; A oldal: 9, 13. és 15. ábrák; B oldal: 16. ábra; D oldal: 8, 10–12, 14. és 17. ábrák. A C oldal, az ún. ferde metszet, amelyre itt nem mutattunk példát.

Az elektronmikroszkópos megfigyelésekből levonható következtetések az alábbi pontokban foglalhatók össze:

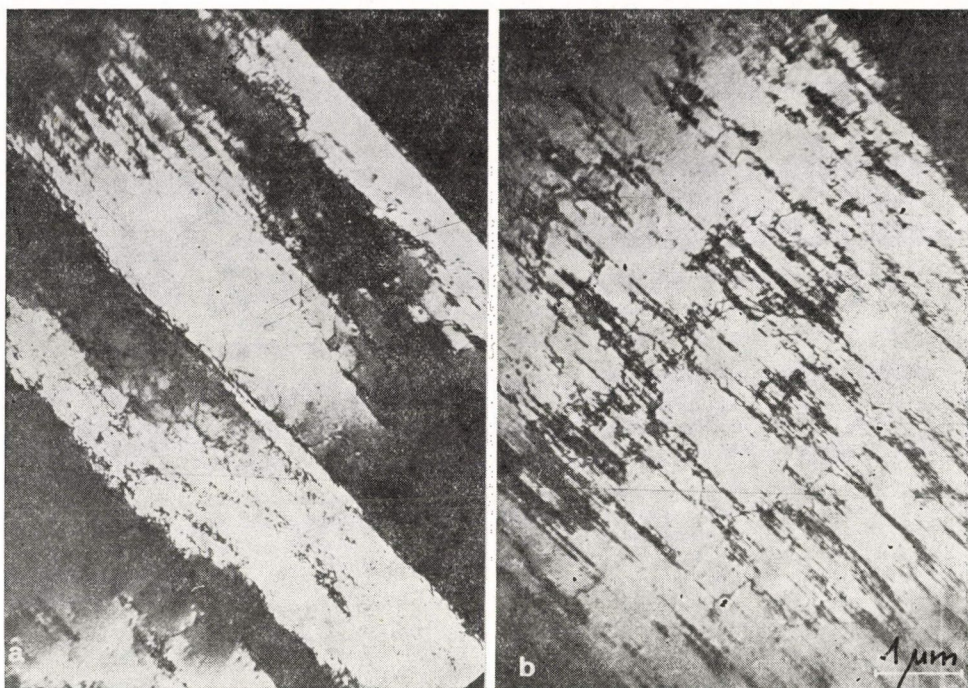
1. Az alakváltozás döntő mértékben a primer csúszási rendszerben megy végbe. Ezt igazolja valamennyi bemutatott TEM felvétel. Még a 16. ábra is ezt igazolja, hiszen a képen látható diszlokációkötegek nagyobb hányada fekszik a primer csúszósíkban és csak kisebb része a keresztcsúszási irányokban.

2. A primer és szekunder diszlokációk kölcsönhatása révén a primer csúszósíkokban Lomer–Cottrell szakaszokból álló hálók alakulnak ki, amelyek a primer csúszósíkkal párhuzamos rétegekben fekszenek. A hálók, jellegzetes módon a kristály egyes tartományait töltik ki (lásd a 14. ábrán a G körüli tartományt és a 17a. ábrát). A hálós és köteges szerkezetek váltokozva töltik ki a kristály egész térfogatát.

3. Az egymással szomszédos hálók a szomszédos makroszkopikus vastagságú rétegek elfordulását okozzák (lásd a 17a. ábrát).

4. Visszaterhelés után a hosszú hatótávolságú belső feszültségek maradnak az anyagban, amit az egyedülálló, hosszú kihajlott diszlokációk jeleznek (lásd a 11a. ábrát).

5. Az alakítás mértékének a növekedésével a diszlokációszerkezetre jellemző valamennyi hosszúság és távolság rövidebb lesz. A dipól kötegekben közelebb kerülnek egymáshoz a dipólok és rövidebbekké válnak a kötegek, ez látható a 8. és 11a. és c. ábrák összevetéséből. A hálók minden mérete megrövidül, amint az a 12. és 15. ábrák összehasonlításából látható.

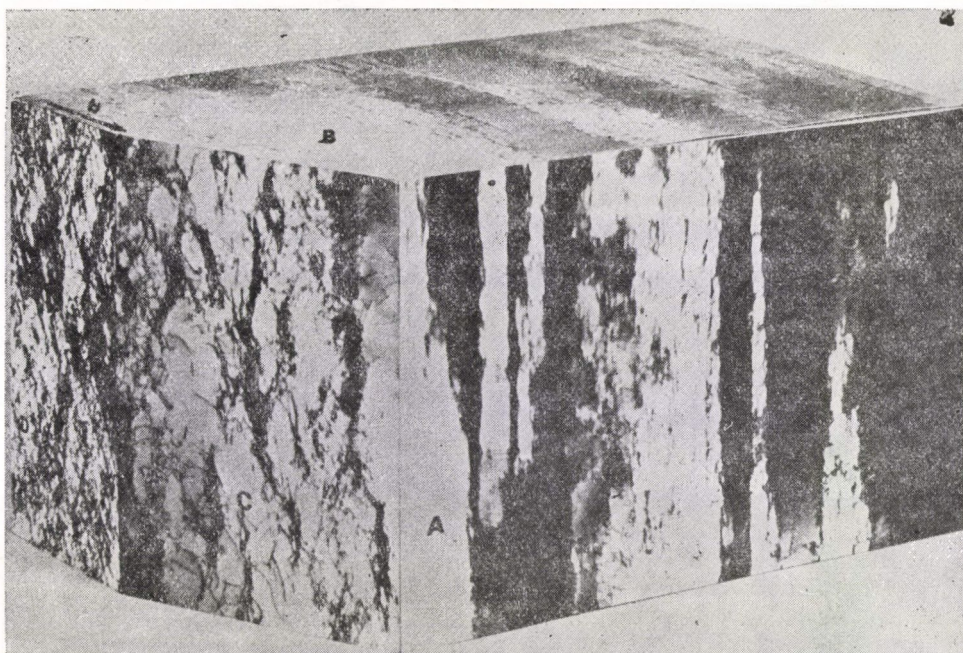


17. ábra. A II. szakasz végéig ($\tau = 38$ MPa) 4,2 K-en alakított Cu egykristályok primer csúszósíkjainak előlnézete. A fólia síkja merőleges a primer csúszás irányára (a). Egymás fölé rétegezett $L-C$ hálók, jellegzetes elfordulási kontrasztkülönbségekkel, (b) rétegesen elhelyezkedő kötegek előlnézete. A képen látható jel $1\ \mu\text{m}$ -t jelöl [26]

6. Ugyancsak az alakítás mértékének a növekedésével egyre gyakrabban figyelhetők meg a keresztcsúszási síkokkal párhuzamosan futó diszlokáció falak, amelyek a primer síkokkal párhuzamos, hálókat, illetve kötegeket kötik össze (lásd a 16. ábrát). A falak az alakítás hőmérsékletétől függően más-más arányban tartalmaznak primer és szekunder diszlokációkat [47]. A falak és a hálók, illetve kötegek alacsony diszlokációsűrűségű tartományokat, ún. cellákat határolnak, amint ez a 16. ábrán látható.

A nem kompenzált éldiszlokációknak a primer csúszósíkokban történő feltorlódása (az ún. „pile-up”-ok [46]) a TEM vizsgálatok alapján rendkívül nehezen vagy egyáltalán nem figyelhetők meg. Ennek az oka az, hogy a feltorlódások általában valamilyen akadálnak, pl. egy dipólkötegnek vagy diszlokáció falnak neki préselt diszlokáció csoportból állnak. Az ilyen helyeken a diszlokációsűrűség igen nagy, a diszlokáció elrendeződés pedig kusza és bonyolult, ezért csak igen nagy felbontású, gyenge-sugár üzemmódban és körültekintő Burgers-vektor analízis segítségével lehetne a feltorlódásban levő és az akadályt alkotó diszlokációkat egymástól megkülönböztetni. További nehézséget jelent, hogy az akadályban a diszlokációsűrűség $1-2$ nagyságrenddel nagyobb, mint a feltorlódásban.

Újabb röntgendiffrakciós vizsgálatok azt mutatták, hogy a hosszú hatótávolságú belső feszültségek a nagy diszlokációsűrűségű dipólus—multipolus kötegekben, mint



18. ábra. Háromdimenziós diszlokációeloszlás különböző metszetek TEM képeiből összeállított modellje. Az egyes TEM képek 4,2 K-en 38 MPa nyírófeszültségig alakított, középre orientált Cu egykristályról készültek [26]

diszlokációfalakban tárolódnak. A diszlokációfalaknak két oldalról nekifeszülő, nem kompenzált diszlokációk — ezek lényegében a feltorlódások — mintegy összepréselik ezeket a falakat. A nem kompenzált diszlokációk egyben biztosítják a cellák és a falak közötti anyagfolytonosságot és ilyen értelemben geometriailag szükséges diszlokációk. Az alacsony diszlokációsűrűségű cellák folyás-feszültsége lényegesen alacsonyabb, mint a diszlokáció falaké, így a külső feszültség növelésével először a cellákban indul meg az alakváltozás. Az anyagfolytonosság úgy marad meg, hogy a cellák határfelületéhez eljutó diszlokációk a cellák belseje felé mutató és az alakváltozás irányára merőlegesen álló többlétsíkokat hoznak létre. Ezek a geometriailag szükséges diszlokációk alkotják a feltorlódásokat és egyben ezek a belső feszültségek forrásai is. A belső feszültségek és az inhomogén diszlokációszerkezet, valamint ezek kapcsolata az alakítási keményedés elméletével további vizsgálatokat igénylő kérdések.

4.5. Az alakítási keményedés III. szakasza

Az alakítási keményedés III. szakaszában, amelyet a keményedési görbe parabolikus viselkedése jellemez [22] (lásd a 7. ábrán a 80%-nál nagyobb nyírási deformációkhoz tartozó tartományt) a diszlokációsűrűség olyan nagy értékeket ér el, hogy a diszlokáció kontrasztok átfedése miatt a diszlokációszerkezet részletei már nem vizsgálhatók TEM segítségével [50]. A diszlokáció szerkezet méretei olyan

kicsikké zsugorodnak, hogy egy szokványos TEM képen hasonló részletek tanulmányozhatók csak, mint a II. szakasz elején egy Berg—Barrett-topogrammon [43].

A felületi vizsgálatok azt mutatják, hogy a II. szakaszra még jellemző, hosszú párhuzamos csúszásvonalak helyett összetöredezett csúszásvonal kötegek jelennek meg, amelyeket helyenként a keresztcsúszás irányában fekvő merőleges csúszásvonalak kötnek össze [8, 51, 52].

Az általános diszlokációszerkezet minőségileg nem tér el a II. szakaszban megfigyelthez képest [53]. A különbség főleg a következőkben áll. A hálók, a kötegek és az ezekre merőleges falak jobban kifejlődnek, ezeken belül a diszlokáció sűrűség erőteljesen megnő és megközelíti az elvileg is lehetséges felső határt, ami durva becslések alapján mintegy $2 \times 10^{17} \text{ m}^{-2}$ [48]. Továbbá, az egész térfogatban kialakul a cellaszerkezet, ahol a cellákon belül a diszlokációs-sűrűség mintegy 1/2 nagyságrenddel kisebb mint a cellafalakban [48].

A visszaterhelés előtt nagy neutron fluxussal rögzített mintában a cellák belsejében nagyszámú egyedülálló, kihajlott diszlokáció figyelhető meg [55], ami jelentős hosszú hatótávolságú belső feszültségek jelenlétére utal. A 4.3 és 4.4 pontokban láttuk, hogy a belső feszültségek az átmeneti szakaszban jelennek meg először és a II. szakasz folyamán egyre nagyobb szerephez jutnak. Ebben a tekintetben is folytonosan fejlődik a III. szakasz, ui. a belső feszültségek itt még erőteljesebbek.

A jelentős belső feszültségek, az erőteljes keresztcsúszás, valamint a III. szakasz hőmérsékletfüggése alapján Seeger és munkatársai [8, 43, 56], valamint Alexander és Haasen e szakasz magyarázatára a következő két mechanizmust javasolták. Az egyik a csavardiszlokációk keresztcsúszására vonatkozik. A csavardiszlokációk az első szakaszban a rugalmas vonzó kölcsönhatás következtében kölcsönösen kiolthatják egymást, mivel egyéb akadályok hiányában elegendően közel kerülhetnek egymáshoz. Ez a mechanizmus a II. szakaszban a megnövekedett szekunder diszlokációs-sűrűség miatt megszűnik működni. A III. szakaszban ismét működni kezd, de itt már egyrészt a megnövekedett külső feszültség, másrészt az ezt támogató termikus aktiválás segíti át a keresztcsúszó csavardiszlokációkat a meglevő akadályokon. Az így egymás mellé kerülő csavardiszlokációk kioltják egymást, ami a $d\tau/da$ csökkenéséhez vezet.

A második mechanizmus az éldiszlokációk kúszómozgása, amellyel az akadályokat egy másik csúszósíkba történő átkúszással és továbbmozgással kerülük ki. Ez a mechanizmus az éldiszlokációk effektív szabad úthosszának megnövekedését eredményezi, ami ugyancsak $d\tau/da$ csökkenéséhez vezet. Ez utóbbi jó összhangban van azzal a megfigyeléssel, mely szerint a III. szakaszban a csúszásvonalak gyakran egymás fölött és egymással párhuzamosan feltorlódhatnak [58].

Mind a csavardiszlokációk keresztcsúszása, mind pedig az éldiszlokációk kúszómozgása csak a diszlokációkra ható jelentős csúsztató feszültség mellett jöhet létre. Ez egyrészt a külső feszültség megfelelő vetületéből, másrészt a hosszúhatótávolságú belső feszültségekből tevődik össze. Az utóbbi időben végzett röntgendiffrakciós vonalszélesedés vizsgálatok azt mutatták, hogy a cellás szerkezetű, erősen inhomogén diszlokáció elrendeződés esetén a belső feszültségek térbeli eloszlása követi a cellák és cellafalak eloszlását [3, 4]. A cellafalakban ébredő eredő ($\tau_{\text{külső}} + \tau_{\text{belső}}$) feszültség az alkalmazott feszültségnek mintegy 1,5–2 szerese, ugyanakkor a cellákon belül csupán 50%-a. A diszlokáció sűrűséggel ilyen mértékben növekvő belső feszültség tehát mintegy kétször préseli mind a csavar, mind az él diszlokációkat a meglevő akadályokon.

5. Összefoglalás

A fentiekben a teljességre való törekvés igénye nélkül, megkíséreltük áttekinteni a fcc egykristályok képlékeny alakítása során kialakuló diszlokációszerkezeteket. Teljes mértékben az elektronmikroszkópos megfigyelésekre támaszkodtunk és nem vettük figyelembe az egyéb, kiegészítő vizsgálati módszerek, mint például a röntgen vonalszélesedés, a neutron kissetűző szórás, a tárolt energia, a fénymikroszkópos metallográfia, a transzporttulajdonságok, a mágneses tulajdonságok és még számos egyéb vizsgálati módszer eredményeit, noha ezek igen lényeges járulékot adhatnak az alakítási keményedés mikromechanizmusának a megértéséhez.

A TEM vizsgálatok eredményei alapján a diszlokáció szerkezetek főbb vonásait a következőkben foglalhatjuk össze.

A diszlokáció szerkezet rendkívüli módon inhomogén. Az alakváltozás legelső szakaszától kezdve ez figyelhető meg és az inhomogenitás a III. szakasz végén abban csúcsosodik ki, hogy a kristályban egymástól szinte élesen elhatárolt cellafalak és ezek által határolt cellák alakulnak ki. A cellafalakban a diszlokációsűrűség eléri a 10^{15} m^{-2} , míg a cellákban nem haladja meg lényegesen a 10^{14} m^{-2} értékeket.

Az egyszeres csúszásra orientált kristályokban a nagy diszlokációsűrűségű helyek kezdetben (a II. szakasz elején és közepén) a primer csúszósíkokkal párhuzamos rétegekben helyezkednek el. A további alakítás során, az ezen rétegek között meginduló primer diszlokációk a megnövekedett szekunder diszlokációsűrűség következtében elakadnak. Az elakadás, egy önmagát erősítő folyamat révén akadályokat hoz létre a rétegek között, míg végül ezek az akadályok a rétegek között húzódó falakká növekednek.

A primer csúszósíkokkal párhuzamosan húzódó rétegekben két jellegzetes és egymástól döntően különböző diszlokáció szerkezet figyelhető meg. Az egyik a Lomer—Cottrell szakaszokból álló háló. A háló vastagsága makroszkopikus értékeket ér el, amit a csúszás irányára merőleges TEM felvételeken jól megfigyelhettünk. Az egymás fölé rétegezett hálók nagy kiterjedésű, makroszkopikus kristálytartományok egymáshoz viszonyított elfordulását okozhatják, amit ugyancsak jól láthattunk a csúszás irányára merőleges metszetek kontrasztváltásai alapján. Ezt az utóbbi elektronmikroszkópos képet Hirsch szőnyeg-mintának nevezte [54], de nem szabad figyelmen kívül hagyni, hogy a sötét-világos kontraszt váltások itt nincsenek kapcsolatban sem a diszlokációsűrűség inhomogenitásával, sem pedig a cellaszerkezettel. A cellaszerkezet metrikája sokkal finomabb, mint a „szőnyegminta csíkozottsága”.

A másik egymás fölé rétegezett diszlokáció szerkezetre a dipól kötegek a jellemzők. A primer csúszósíkkal párhuzamos metszet TEM képén jól felismerhető a Lomer—Cottrell-hálók és a dipól kötegek közötti különbség. Az előbbieket ugyanis a primer-konjugált és primer-kritikus síkok metszésvonalai mentén, az utóbbiak viszont a primer Burgers-vektorra merőleges irányban mutatnak kitüntetett irányítotttságot.

Mind a hálók, mind pedig a kötegek egymás feszültség és deformációs terét erőteljesen leárnyékoló diszlokációdipól és multipól halmazokból állnak. Ezekben a kuszák halmazokban a szegmens-hossz igen rövid és a szegmensek kihajlításához szükséges feszültség igen nagy.

Már a II. szakasz kezdetétől igen jelentős, a folyásfeszültség értékével azonos nagyságrendű belső feszültségek vannak jelen. A jelen dolgozatban nem részletezett, de már említett röntgendiffrakciós vizsgálatok azt mutatták, hogy a belső feszültségek térbeli eloszlása nagyjából követi a diszlokációsűrűség térbeli eloszlását [3, 4].

Ez azt is jelenti, hogy amikor a cellaszerkezet kialakul, akkor a belső feszültségek a cellaszerkezetnek megfelelő térbeli eloszlást mutatnak. Ezek a kísérleti tapasztalatok igen jól alátámasztják *Hirsch* és *Mitchell* egy korábbi megállapítását, amely szerint a kristály egymástól jól elkülönülő kemény és puha tartományokból áll [54]. A puha tartományokban a diszlokációsűrűség kicsi, míg a kemény tartományokban nagy. Ilyen értelemben az inhomogén deformáció hatására kialakuló szerkezet sok hasonlóságot mutat a kompozitokkal. Ez a fajta viselkedés szinte ideális körülmények között valósul meg a húzó—nyomó alakítással fárasztott kristályokban [59].

Hirsch és *Mitchell* helyesen ismerték fel, hogy az inhomogén diszlokáció eloszlás puha és kemény tartományokra szabdalja az anyagot, de az általuk javasolt képlékeny alakítási mechanizmusban nem vették figyelembe kellő mértékben a belső feszültségek szerepét és ezért helytelenül arra a következtetésre jutottak, hogy az alakváltozás kizárólag a puha tartományokban megy végbe, miközben a kemény részek egyetlen szerepe a mozgó diszlokációk feltartóztatásában áll. A belső feszültségekről kiderült azonban, hogy éppen a kemény tartományokban a legnagyobbak és ezeken a helyeken a külső feszültséggel egy irányba működve még a legkisebb szegmenseket is képesek kihajlítani [6, 48]. A belső feszültségek működési mechanizmusának részletes vizsgálata igen lényeges az alakítási keményedés elmélete szempontjából és további kutatásokat igényel. A TEM vizsgálatok tanúsága szerint mind a diszlokációsűrűség, mind a nagy diszlokációsűrűségű helyek átlagos távolsága, egyszóval a diszlokáció szerkezet geometriai metrikája monoton változik az alakítás mértékével. A diszlokáció szerkezet metrikájának az alakítással párhuzamos zsugorodása nyilvánvaló és ezzel minden szerző egyetért [9, 14, 15, 19, 22, 43, 48]. Ez azonban a képlékeny alakváltozásnak csupán egy kiragadott vonása, amely nem adhat magyarázatot az alakítási keményedés valamennyi részletére. A metrika zsugorodását Kuhlmann—Wilsdor az ún. hasonlósági elvben fogalmazta meg, amelyről már korábban esett szó. A hasonlósági elv meglehetősen formális, ugyanis nem veszi tekintetbe, hogy a szomszédos diszlokációk feszültségterének leárnyékolása erőteljesen függ a különböző diszlokációszerkezetekben levő diszlokációk különböző konfigurációjától. A döntően dipól jellegű konfigurációban a leárnyékolás sokkal hatásosabb, mint az olyan konfigurációban, amelyre a kompenzálatlan diszlokációk jelenléte a jellemző. Ez utóbbi konfiguráció szélsőségesen valósul meg a geometriailag szükséges diszlokációk esetében. A hálókba, kötegekbe és falakba tömörülő diszlokációk dipól és multipól konfigurációban vannak és ezáltal egymás feszültségterét a lehető legnagyobb mértékben leárnyékolják. Ugyanakkor a köztes tartományokban a diszlokációk dipól jellege jelentősen gyengébb és hosszú hatótávolságú, kompenzálatlan feszültségterek maradnak szabadon. Ez a kétféle árnyékolási mód azt eredményezi, hogy a falak, hálók és kötegek, a közel egy nagyságrenddel nagyobb diszlokációsűrűségük ellenére a feszültségeknek mindössze mintegy 2—3-szorosát hordozzák a cellák belsejéhez viszonyítva.

A TEM vizsgálatok, mint láttuk igen részletesen megadják a diszlokációszerkezet sztatikus szerkezetét. Azonban az alakítási keményedésnek a valósághoz közelebb álló elméletének figyelembe kell vennie a diszlokáció szerkezet dinamikus tulajdonságait is. Ezen tulajdonságok jobb megismerése, valamint ezeknek a beépítése az alakítási keményedés eddigi elméleteibe további kísérleti és elméleti vizsgálatokat igényel.

IRODALOM

1. A. H. Cottrell, Dislocations and Plastic Flow in Crystals, Clarendon Press, Oxford, 1953.
2. A. H. Cottrell and R. J. Stokes, Proc. Roy. Soc. A233, 17, 1955.
3. T. Ungár, H. Mughrabi, D. Rönnpögel and M. Wilkens, Acta Met. 32, 333 (1984).
4. T. Ungár, H. Mughrabi and M. Wilkens, Proc. 5th Int. Symp. Met. Mat. Sci. Risø, 1984, p. 539.
5. H. Mughrabi, Proc. Fifth Int. Conf. Strength Met. Alloys, Aachen, 1979, Vol. 3, ed. P. Haasen, V. Gerold and G. Kostorz, Pergamon Press, Oxford, 1980, p. 1615.
6. H. Mughrabi, Proc. Fourth Int. Conf. Continuum Model of Discrete Systems, Stockholm, ed. O. Brulin and R. K. T. Hsieh, North-Holland, Amsterdam, 1981, p. 241.
7. G. I. Taylor, Proc. Roy. Soc., A145, 362, 1934.
8. A. Seeger, J. Diehl, S. Mader and H. Rebstock, Phil. Mag. 2, 323, 1957.
9. A. Seeger, Handbuch d. Physik, Vol. VII/2, Springer, Berlin, 1958.
10. A. Seeger, S. Mader and H. Kronmüller, Electron Microscopy and Strength of Crystals, ed. G. Thomas and J. Washburn, Interscience, New York, 1963, p. 665.
11. H. Kronmüller and A. Seeger, J. Phys. Chem. Solids, 18, 93, 1961.
12. H. Kronmüller, Can. J. Phys. 45, 631, 1967.
13. P. M. Hazzledin and P. B. Hirsch, Phil. Mag. 15, 121, 1967.
14. P. B. Hirsch and T. E. Mitchell, Can. J. Phys. 45, 663, 1967.
15. F. R. N. Nabarro, Z. S. Basinski and D. B. Holt, Adv. in Physics, 13, 193, 1964.
16. Z. S. Basinski, Acta Met. 5, 684, 1957.
17. Z. S. Basinski, Phil. Mag. 4, 393, 1959.
18. D. Kuhlmann—Wilsdorf, Trans. AIME, 224, 1047, 1962.
19. D. Kuhlmann—Wilsdorf, Work Hardening, ed. J. P. Hirth and J. Weertman, Gordon and Breach, Science Publ., New York, 1968, p. 97.
20. D. Kuhlmann—Wilsdorf and J. H. van der Merwe, Mat. Sci. Eng. 55, 79, 1982.
21. P. B. Hirsch, A. Howie, R. B. Nicholson, D. W. Pashley and M. J. Whelan, Electron Microscopy of Thin Crystals, Butterworths, London, 1965.
22. I. Kovács and L. Zsoldos, Dislocations and Plastic Deformation, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1973, p. 252.
23. N. Thompson, Proc. Phys. Soc., London, B. 66, 481, 1953.
24. G. I. Taylor and C. F. Elam, Proc. Roy. Soc. A108, 28, 1925.
25. F. D. Rosi and C. H. Mathewson, Trans. AIME, 188, 1159, 1950.
26. S. J. Basinski and Z. S. Basinski, Dislocations in Solids, ed. F. R. N. Nabarro, North-Holland, Amsterdam, 1979, p. 261.
27. Kovács I. és Zsoldos L., Diszlokációk és képlékeny alakváltozás, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1965.
28. Kovács I., Magy. Fiz. Folyóirat, 25, 113, 1977.
29. Kovács I., Magy. Fiz. Folyóirat, 28, 3, 1980.
30. Vörös Gy. és Kovács I., Magy. Fiz. Folyóirat, 29, 201, 1981.
31. R. Berner and H. Kronmüller, Moderne Probleme der Metallphysik, Vol. 1, ed. A. Seeger, Springer, Berlin, 1965, p. 35.
32. L. M. Clarebrough and M. E. Hargreaves, Progr. Metal Physics, 8, 1, 1959.
33. T. E. Mitchell, Progr. Appl. Material Res. 6, 117, 1964.
34. E. Schmid, Proc. Int. Congr. Appl. Mech. Delft, 1924, p. 342.
35. K. F. v. Göler and G. Sachs, Z. Physik, 41, 103, 1929.
36. L. S. Tóth, I. Kovács and J. Lendvai, J. Material Sci. közlésre béküldve.
37. J. D. Livingston, J. Appl. Physics, 31, 1071, 1960.
38. F. W. Joung, J. Appl. Physics, 33, 963, 1962.
39. F. W. Joung, J. Phys. Soc. Japan, 18, Suppl. 1, 1, 1963.
40. U. Essmann, Phys. Stat. Sol. 12, 707, 1965.
41. F. W. Joung, Jr., and F. A. Sherrill, Can. J. Phys. 45, 757, 1967.
42. M. Wilkens, Can. J. Phys. 45, 567, 1967.
43. A. Seeger and M. Wilkens, II. Int. Symp. Reinststoffe in Wissenschaft u. Technik, Akademie-verlag, Berlin, 1967, p. 29.
44. U. Essmann, Phys. Stat. Sol. 12, 723, 1965.
45. H. Alexander, Phys. Stat. Sol. 27, 391, 1968.
46. A. Seeger, Work Hardening, ed. J. P. Hirth and J. Weertman, Gordon and Breach, Science Publ. New York, 1968, p. 27.
47. U. Essmann and H. Strunk, Z. Metallk. 61, 667, 1970.

48. *H. Mughrabi*, Constitutive Equations in Plasticity, ed. *A. S. Argon*, *M. I. T. Press*, Cambridge Mass., 1975. p. 199.
49. *H. Mughrabi*, Report prep. NBS, 1982.
50. *M. Wilkens*, Phys. Stat. Sol. 2, 359, 1970.
51. *S. Mader*, Z. Physik, 149, 73, 1957.
52. *J. Diehl*, *S. Mader* and *A. Seeger*, Z. Metallk. 46, 650, 1955.
53. *J. N. Steeds*, Proc. Roy. Soc. A292, 343, 1966.
54. *P. B. Hirsch* and *T. E. Mitchell*, Work Hardening, ed. *J. P. Hirth* and *J. Weertman*, Gordon and Breach, Sci. Publ. New York, 1968. p. 65.
55. *H. Strunk* and *U. Essmann*, Z. Metallk. 60, 367, 1969.
56. *A. Seeger* and *H. Träuble*, Z. Metallk. 51, 435, 1960.
57. *H. Alexander* and *P. Haasen*, Acta Met. 9, 1001, 1961.
58. *A. Seeger*, The Relation between the Structure and Mechanical Properties of Metals, HMSO, London, 1963. p. 4.

2. EGYKRISTÁLYOK CIKLIKUS ALAKVÁLTOZÁSA

HONYEK GYULA

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOM

1. Bevezetés	379
2. Egykristályok ciklikus deformációja és mikroszerkezete	380
3. Az állandósult csúszási sávok képződésének modellje	383
4. A ciklikus alakítás kompozit modellje	384
5. A stacionárius ciklikus deformáció mechanizmusa	386
6. Ciklikusan alakított fémek felületi érdessége	388
7. Ötvözetek, polikristályos fémek fárasztása	389
8. Összefoglalás	390
9. Irodalom	391

1. Bevezetés

A szerkezeti anyagokban periodikus terhelések hatására (fárasztásra) bekövetkező mikroszerkezeti változások megismerése igen fontos, nagy gyakorlati jelentőségű feladat. A probléma rendkívül összetett és még közel sem teljes mértékben megoldott, mégis úgy tűnik, hogy a fáradásos repedést megelőző ciklikus plasztikus deformáció közben lejátszódó diszlokációs szerkezeti változásokat, illetve deformációs mechanizmusokat sikerült kielégítően leírni. Az erről a témáról szóló publikációk, amelyek a hetvenes évek közepétől napjainkig egyre nagyobb számban jelennek meg, főként tiszta fémek egykristályain végzett elektronmikroszkópos vizsgálatokra támaszkodnak.

A ciklikus alakváltozás elméletének két fontos, egymással összefüggő jelenséget kell megmagyaráznia, a fárasztás során bekövetkező erős felszíni durvulást és az állandósult csúszási sávok működését.

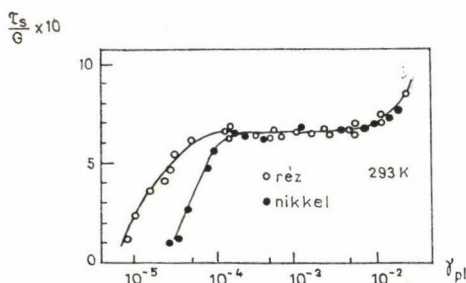
A fárasztás során fellépő felszíni durvulást már *Ewing* és *Humfrey* is észlelte [1], amikor az első metallográfiai vizsgálatot elvégezte 1903-ban fárasztott svéd acél mintákon. Munkájukhoz hasonló mérőldkő volt 1954-ben az első elektronmikroszkópos vizsgálat, amelyet *Hunter* és *Fricke* végzett el ciklikusan terhelt alumínium ötvözeteken [2]. Az állandósult csúszási sáv (persistent slip band) kifejezést *Thompson*, *Wadsworth* és *Louat* vezették be [3], akik réz és nikkel minták csúszolt felületét vizsgálták különböző mértékű ciklikus deformáció után, és a felvételeken sok csúszási sávot észleltek. Azonban míg a legtöbb sáv elektropolírozással könnyen eltüntethető volt, néhányat közülük csak erős polírozással lehetett megszüntetni, illetve további ciklikus terhelések után ezek a sávok ugyanazonokon a helyeken újra megjelentek. A szerzők ezért nevezték el ezeket a csúszási sávokat „állandósultaknak”.

Az állandósult csúszási sávok polikristályos anyagok fárasztása során is megjelennek, ezt azonban egészen a legutóbbi évekig felületi jelenségnek tekintették [4].

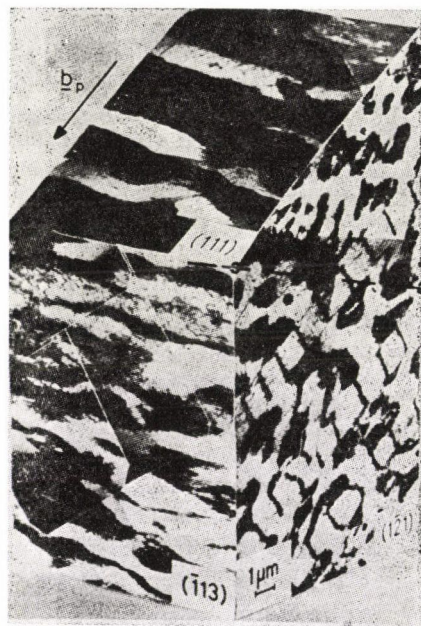
Nemrég azonban kimutatták, hogy állandósult csúszási sávok a polikristályos anyagok belső szemcséiben is találhatóak [5, 6]. A polikristályos anyagokban a szemcsehatárok megakadályozzák a sávok terjedését [7], ezért tanulmányozásukra célszerűbb egykristályokat használni.

2. Egykristályok ciklikus deformációja és mikroszerkezete

A tiszta felületen centrált köbös (fck) fémek egykristályai és polikristályai már kicsiny képlékeny nyúlási amplitúdók esetén is jelentős ciklikus keményedést mutatnak [8], ami a viszonylag könnyű diszlokáció sokszorozódás következménye. Egyszeres csúszásra orientált egykristályokban $\gamma_{pl} \approx 10^{-4}$ nyírási deformáció felett kezdenek kialakulni az állandósult csúszási sávok. A ciklikus feszültség-deformáció görbék ekkor stacionárius szakaszba érnek (1. ábra), ami az állandósult csúszási sávok megjelenésével kapcsolatos [8—11]. A ciklikus feszültség-deformáció görbéket úgy nyerjük, hogy az alkalmazott képlékeny nyírási deformáció függvényében ábrázoljuk az adott deformáció megvalósulásához szükséges nyírási feszültség telítési értékét, vagyis azt a feszültség értéket, amelyhez a csúszósíkban, a csúszási irányba mutató nyírási feszültség értéke tart a fárasztási vizsgálat során a ciklusszám növekedtével, rögzített nyírási deformáció esetén. Az 1. ábrán réz és nikkel egykristályok ciklikus feszültség-deformáció görbéi láthatók, ahol a feszültség értékek a megfelelő nyírási modulusokkal vannak normálva. Az azonos deformációs mechanizmusra utal, hogy a mérési pontok 10^{-4} deformáció fölött mindkét fém esetén közel ugyanarra a görbére esnek. Jelentősebb különbség csak az alacsony deformációs amplitúdók esetén található, ami valószínűleg a vizsgált egykristályok eltérő szennyezettségének a következménye [4].



1. ábra. Réz és nikkel egykristályok ciklikus feszültség-deformáció görbéi

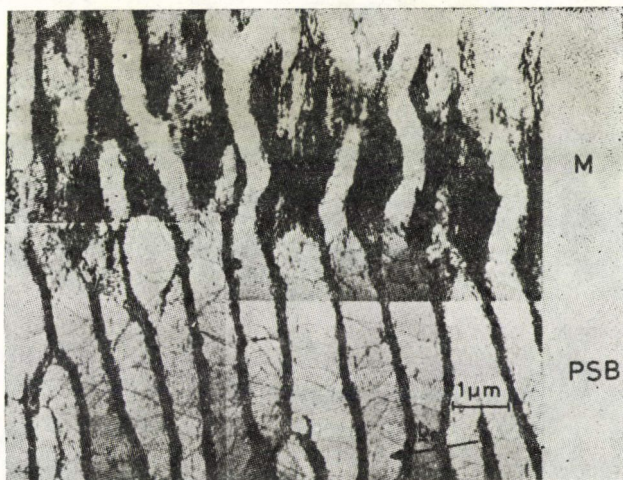


2. ábra. Három dimenziós montázs réz egykristály telítésig deformált diszlokáció elrendeződéséről. A minta tengelye, amelyet szaggatott vonal jelez, csaknem pontosan az $(1\bar{2}1)$ síkban fekszik és 47° -os szöget zár be b_p -vel.
 $\gamma_{pl} = 1,5 \times 10^{-3}$

A transzmissziós elektronmikroszkópos vizsgálatok azt mutatják, hogy kis mértékű deformációk mellett a ciklikus keményedés csaknem teljesen a primer csúszósíkokon felhalmozódó diszlokációk következménye. A növekvő diszlokációsűrűséggel inhomogén eloszlású diszlokációsávok fejlődnek ki. Amikor a diszlokációsűrűség a deformációs sávban elér egy kritikus értéket, a mátrix instabillá válik és a primer csúszósíkkal párhuzamosan lemezszerű állandósult csúszási sávok fejlődnek ki. Ily módon az eredeti hibaszerkezet helyett jellegzetes kettős szubszerkezet fejlődik ki. Ez a kettős szerkezet az állandósult csúszási sávokból, illetve az eredeti mátrixból áll.

A szerkezet jobb térbeli elképzelése érdekében *Mughrabi és munkatársai* [4] ugyanolyan módon fárasztott, különböző minták megfelelő orientációjú metszeteinek elektronmikroszkópos felvételeiből térbeli montázst készítettek (2. ábra). Az ábrán szaggatott vonal jelzi a minta tengelyének irányát, amely csaknem az $(1\bar{2}1)$ síkban fekszik és 47° -os szöget zár be a b_p primer Burgers-vektor irányával, amely az (111) primer csúszási síkban helyezkedik el. A vizsgált minta réz egykristály volt, amelyet stacionárius szakaszig ($\gamma_{pl} = 1,5 \times 10^{-3}$) deformáltak ciklikusan. Az $(1\bar{2}1)$ síkról készült felvételen jól látható az állandósult csúszási sávokra jellemző „létra”-szerkezet, amelynek falai merőlegesek a b_p primer Burgers-vektorra (lásd 4. ábrát is).

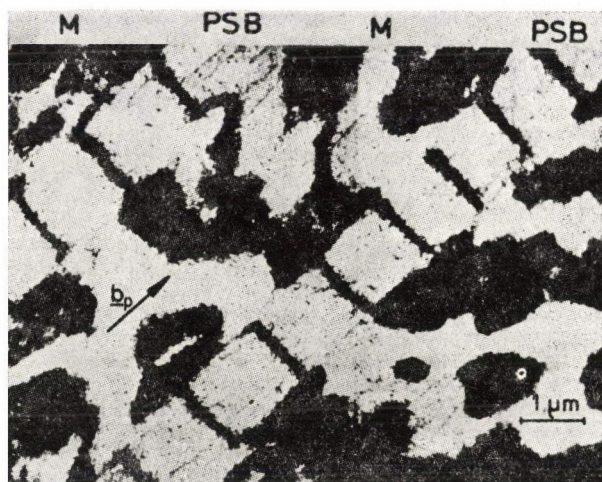
Mind a mátrixon, mind az állandósult csúszási sávon belül kialakul egy cellaszerű szerkezet, amelyben a szélesebb diszlokációszegény és főleg csavardiszlokációkat tartalmazó csatornákat kötegekbe tömörült keskeny éldiszlokáció multipólusok választják el. A mátrix és a csúszási sáv szerkezete közötti döntő különbség az, hogy míg a csúszási sávban az éldiszlokáció multipólusok keskeny és kicsiny térfogatot (a teljes térfogat 10%-át) elfoglaló falakat alkotnak, addig a mátrixban a multipólusok lazább, a térfogat mintegy 50%-át kitöltő erezetként helyezkednek el. Réz és nikkal mintákban az állandósult csúszási sávokban a tipikus fal méretek $1,5 \mu\text{m}$ körüliek.



3. ábra. Ciklikusan telítésg deformált réz egykristály TEM-felvétele.

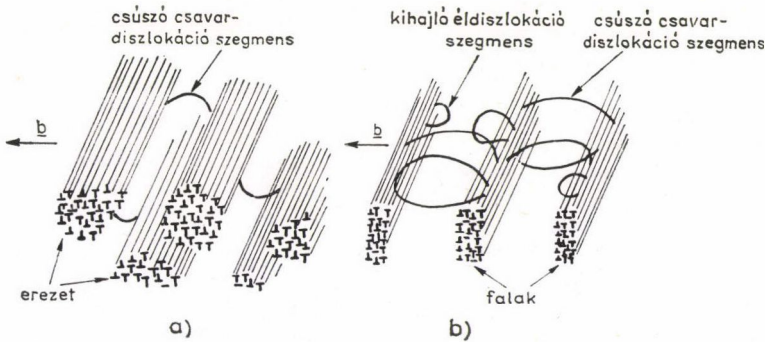
A minta síkja megközelítőleg az (111) primer csúszási síkban fekszik. $\gamma_{pl} = 10^{-3}$, M = mátrix, PSB = állandósult csúszási sáv

További részleteket figyelhetünk meg a 3. és 4. ábrán. A 3. ábrán látható elektronmikroszkópos felvétel egy olyan fóliáról készült, amelynek síkja csak enyhén tért el az (111) primer csúszósíktól. Az ábra jól mutatja a mátrixra jellemző erezet átalakulását falakból álló szerkezetté, amelyek az állandósult csúszási sávokban találhatók. A falakból sok helyen kis görbületű éldiszlokáció szegmensek hajlanak ki (terheletlen állapot), hosszú hatótávolságú belső feszültségek jelenlétét jelezve ezeken a helyeken [12]. A belső feszültségek ilyen bizonyítékát a mátrixban nem láthatjuk. A diszlokációszegény tartományokban, különösen a „fal”-szerkezet esetén, primer csavardiszlokációkat találhatunk kissé kihajolva a falak vagy az erek között. Sűrűségük sokkal nagyobb a falak között ($\sim 10^{13} \text{ m}^{-2}$), mint az erek között ($\sim 10^{12} \text{ m}^{-2}$) [4]. A csavardiszlokációk, amelyek gyakran dipólokként jelennek meg, a 4. ábrán is láthatók, amely a b_p -vel párhuzamos ($\bar{1}\bar{2}1$) síkú metszetről készült. A legközelebbi dipólok észlelt $h \approx 500 \text{ \AA}$ távolsága arra utal, hogy ez egy kritikus érték, ennél közelebbi csavar dipólok már instabilak és megsemmisülnek.



4. ábra. ($\bar{1}\bar{2}1$) metszetű TEM-felvétel ugyanarról a réz egykristályról, mint a 2. ábrán. Jól megfigyelhetők a csavardiszlokációk az állandósult csúszási sávok falai közötti csatornában

Más vizsgálatok [9, 12] eredményeit is felhasználva az állandósult csúszási sávokban található diszlokációelrendeződés a következő különbségekkel jellemezhető a mátrixhoz képest. 1. A sűrű diszlokáció kötegek kisebb térfogati hányadot foglalnak el. 2. A másodlagos diszlokáció tartalom nagyobb. 3. A szabad (mozgóképes) csavardiszlokációk sűrűsége nagyobb. 4. Hosszú hatótávolságú belső feszültségek léteznek, amelyek amplitúdója a csúcsfeszültségnek felel meg. Ezeknek a tulajdonságoknak megfelelően az állandósult csúszási sávokban sokkal nagyobb deformációk lokalizálódnak, mint a mátrixban [10, 11, 13, 14]. A fenti diszlokáció elrendeződések vázlatos rajzát láthatjuk az 5. ábrán [8].



5. ábra. A diszlokáció elrendeződés vázlatos ábrázolása a mátrix (a) és az állandósult csúszási sávok (b) esetén

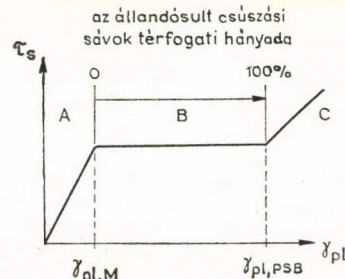
3. Az állandósult csúszási sávok képződésének modellje

Az előzők alapján a tiszta fcc fémek egykristályaiban ciklikus alakítás közben kialakuló állandósult csúszási sávok viselkedésének egy egyszerű modelljét dolgozták ki [9–12, 14, 15], amely az 1. ábrán látható mérési eredményeket modellelzi. A modell alapján megrajzolható idealizált ciklikus feszültség-deformáció görbe a 6. ábrán látható, amely három különböző tartományra bontható. Az *A* tartományban ciklikus alakítási keményedés játszódik le többé-kevésbé homogén módon, vagyis a τ_s nyírófeszültség növekszik a γ_{pl} képlékeny nyírási deformáció növekedtével. A *B* tartomány kezdete egybeesik az állandósult csúszási sávok első megjelenésével, amelyek a primer csúszósíkkal párhuzamos, vékony lamellák formájában alakulnak ki [9, 13, 15, 16]. A $\gamma_{pl,M}$ küszöbfeszültség után az állandósult csúszási sávok térfogati hányada fokozatosan nő, s végül kiterjed a minta teljes térfogatára. Így ebben a stacionárius szakaszban a deformáció inhomogénná válik, és erősen az állandósult csúszási sávokban lokalizálódik.

Amíg a mintában a mátrixra jellemző diszlokációszerkezet fokozatosan át nem alakul teljesen az állandósult csúszási sávokra jellemző szerkezetté, addig a feszültségi amplitúdó a képlékeny nyúlási amplitúdó növekedése ellenére állandó marad. A mérések alapján (1. ábra) eközben a deformáció jelentős mértékben, hozzávetőlegesen két nagyságrenddel nő, így $\gamma_{pl,PSB} \approx 10^2 \gamma_{pl,M}$. Winter modellje [10] alapján az állandósult csúszási sávok térfogati hányada lineárisan nő a képlékeny nyúlási amplitúdó növekedtével, vagyis a *B* tartomány valamely pontjában a teljes deformáció két tagból áll:

$$\gamma_{pl} = \gamma_{pl,PSB} f_{PSB} + \gamma_{pl,M} (1 - f_{PSB}), \quad (1)$$

ahol f_{PSB} az állandósult csúszási sávok térfogati hányada, míg $\gamma_{pl,M}$ és $\gamma_{pl,PSB}$ a tiszta mátrixra, illetve tiszta csúszási sávra jellemző lokális nyírási amplitúdó.



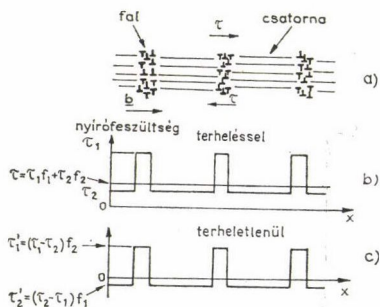
6. ábra. Egykristály minta idealizált ciklikus feszültség-deformáció görbéje, bemutatva az állandósult csúszási sávok képződését

Nagyobb γ_{pl} deformációk esetén a 6. ábra C tartományában ismét egy új szerkezet alakul ki, ami a τ_s nyírási feszültség növekedésével jár együtt. Megjegyezzük, hogy a Winter-modell alapvető feltevése az, hogy a mátrix és az állandósult csúszási sávok tulajdonságai nem függenek a γ_{pl} képlékeny nyírási amplitúdótól a B tartományban, ami csak közelítőleg igaz.

4. A ciklikus alakítás kompozit modellje

Deformált kristályos anyagokban a diszlokációk inhomogén eloszlását általában nem szokták számításba venni a képlékenységi elméleti modelljeiben. A mátrix és az állandósult csúszási sávok esetében fázisított fémekben a diszlokációsűrűségek az erezetben (mátrix) és a falakban (állandósult csúszási sávok) $10^{15} - 10^{16} \text{ m}^{-2}$ értékűek [12, 20], míg az erek, illetve falak közti csatornában a diszlokációsűrűség legalább két-három nagyságrenddel kisebb. A nagy diszlokációsűrűségű sötét erek és falak, illetve a világos színűnek látszó csatornák jól elkülönülnek például a 4. ábrán. Indokoltnak látszik feltételezni, hogy az erek és falak deformációja nagyobb helyi feszültségeket kíván, mint a csatornák deformációja. Mivel a „kemény” erek és falak jelentős térfogati hányadot foglalnak el ($\approx 50\%$, illetve $\approx 10\%$), a mátrix és az állandósult csúszási sávok ciklikus nyírási viselkedését nem lehet kielégítően tárgyalni egyedül a csatornában lejátszódó diszlokációs folyamatok figyelembevételével, hasonlóan más inhomogén elhelyezkedő diszlokációs szerkezetekhez, mint pl. a cellás struktúrák esetén.

Egy általánosabb leírást alkalmazva, *Mughrabi* feltételezte [8], hogy külső feszültség hatására a mátrix és az állandósult csúszási sávok úgy viselkednek, mint egy kompozit szerkezet, amely egy diszlokációban gazdag kemény fázisból (erek, falak) és egy lágy diszlokációszegény fázisból (csatornák) áll. Korlátozódjunk csak a ciklikus telítés esetére és hanyagoljuk el az egy cikluson belüli alakítási keményedési effektusokat. Ekkor a mátrixra és az állandósult csúszási sávokra egy *Masing*-típusú modell alkalmazható [17], amely két ideálisan rugalmas-képlékeny elemből épül fel, vagyis az erekből (illetve falakból) álló 1. fázisból és a csatornákból álló 2. fázisból, amelyek helyi folyási feszültsége τ_1 , illetve τ_2 , és amelyek egymással párhuzamosan, az alakváltozás kompatibilitását megtartva deformálódnak.



7. ábra. A kompozit modell alkalmazása az állandósult csúszási sávok fal szerkezetére: a) Vázlatos diszlokáció elrendeződés; b) a lokális feszültségek eloszlása terhelés alatt; c) a maradék belső feszültségek eloszlása a terhelés megszüntetése után

Vizsgáljuk az állandósult csúszási sávok esetét, amelyet a 7. ábrán ábrázoltunk szemantikusan, feltüntetve a lokális feszültségeket a terhelés melletti és terheletlen állapotokban. Mivel az állandósult csúszási sávokban a teljes ciklikus nyírási deformáció $\approx 10^{-2}$, ami túl nagy mértékű ahhoz, hogy a két fázis illeszkedését rugalmas nyírási deformációk biztosítsák, így mindkét fázisban képlékeny folyás jön létre egy cikluson belül. Külső nyírófeszültség alkalmazásakor rugalmas nyírási történik, amíg

a teljes (rugalmas) nyírási deformáció el nem éri a τ_2/G értéket. Ezután a lágy csatornák képlékenyen, a kemény falak pedig rugalmasan deformálódnak, amíg a teljes nyírási deformáció el nem éri a τ_1/G értéket. A továbbiakban a keményebb tartomány is képlékenyen deformálódik. Az ekkor alkalmazott feszültséget makroszkopikus folyásfeszültségnek tekinthetjük (a 6. ábrán a vízszintes szakasz feszültsége), ami lokális skálán a 7b. ábrának megfelelően a

$$\tau = \tau_1 f_1 + \tau_2 f_2 \quad (2)$$

összefüggés szerint oszlik el, ahol f_1 és f_2 a kemény és a lágy tartományok térfogati hányada. A feszültséget megszüntetve a kemény, illetve a lágy fázisban

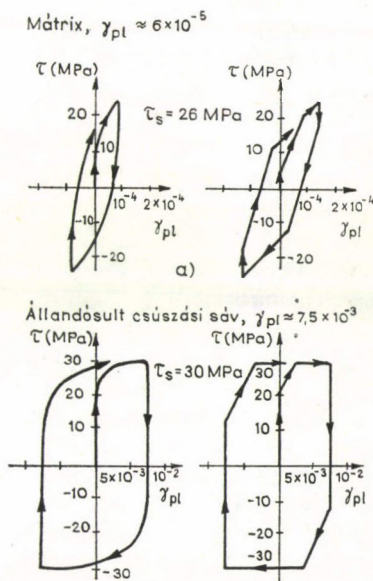
$$\tau'_1 = (\tau_1 - \tau_2) f_2 \quad \text{és} \quad \tau'_2 = (\tau_2 - \tau_1) f_1 \quad (3)$$

belső feszültségek maradnak vissza, amelyek ellentétes előjelűek, és teljesül rájuk, hogy

$$\tau'_1 f_1 + \tau'_2 f_2 = 0. \quad (4)$$

Hasonló megfontolásokat tehetünk a mátrix esetén is. Mind a mátrix, mind az állandósult csúszási sávok telítési ciklikus deformációja közben megfigyelhető hiszterézis hurkok kielégítő módon írhatók le a kompozit modell segítségével [18]. A 8. ábrán az észlelt és a modell alapján számított telítési hiszterézis hurkok láthatók. Az ábráról megállapíthatjuk, hogy a döntő különbség a mátrix és az állandósult csúszási sávok között az, hogy a mátrix ciklikus deformációja a stabilitási határig nem vezet a kemény erezet lényeges képlékeny folyásához, míg ugyanakkora feszültségek megjelenésekor a csatornák és a falak együttesen nyíródnak az állandósult csúszási sávok esetén. Ez azzal magyarázható, hogy ha a deformáció a $\gamma_{pl,M}$ értéket túllépi, akkor a mátrixbeli metastabil erezet helyi szerkezete lerombolódik és átalakul az állandósult csúszási sávok szerkezetébe. Így a 8. ábra a plató két végének határhelyzetét írja le, és bármely közbülső helyzet a deformációk megfelelő szuperpozíciójával jellemezhető az (1) egyenletnek megfelelően.

A fenti kompozit modell alapján a τ_{PSB} küszöb feszültséget olyan termikus hatásoktól jelentős mértékben független feszültségnek tekinthetjük, amelynek elérése okozza a mátrixban a csatornák és az erezet folyását. Ezt az elképzelést erősíti meg az, hogy különböző anyagokra szobahőmérsékleten a τ_{PSB}/G érték megközelítően állandó.



8. ábra. Az észlelt és a számított hiszterézis hurkok összehasonlítása: a) mátrix, b) állandósult csúszási sávok

5. A stacionárius ciklikus deformáció mechanizmusa

A ciklikus stacionárius deformáció alapvető követelménye, hogy a diszlokáció sűrűség ne változzon, két különböző mechanizmus alapján teljesíthető [11, 12]. 1. Ugyanazok a diszlokációk csúszsanak előre és vissza diszlokáció sokszorozódás és megsemmisülés nélkül. 2. A diszlokáció sokszorozódás és megsemmisülés között dinamikus egyensúly álljon be. Mint látni fogjuk a továbbiakban az 1. mechanizmus a mátrixra, míg a 2. mechanizmus az állandó csúszási sávokra teljesül.

Tekintsük először a diszlokáció szegény tartományokat. A transzmissziós elektron mikroszkópos vizsgálatok [12, 19] alapján megállapíthatjuk, hogy ezekben a tartományokban a deformáció nagymértékben a primer csavardiszlokációk csúszásával valósul meg. A csavardiszlokációk sűrűségét ϱ -val, egy negyed ciklus alatti valódi csúszási távolságukat L -el jelölve a képlekeny deformációra a következő összefüggést kapjuk:

$$\gamma_{pl} = \varrho bL, \quad (5)$$

ahol b a Burgers-vektor. Figyelembe véve, hogy a csúszósíkokon az ellentétes előjelű csavardiszlokációk keresztcsúszással kioltathatják egymást, ha egy kritikus h távolságnál közelebb kerülnek egymáshoz, továbbá hogy az állandósult csúszási sávokban a csavardiszlokációk csoportokba rendeződhetnek, kapjuk, hogy

$$\varrho < \frac{n}{2Lh}, \quad (6)$$

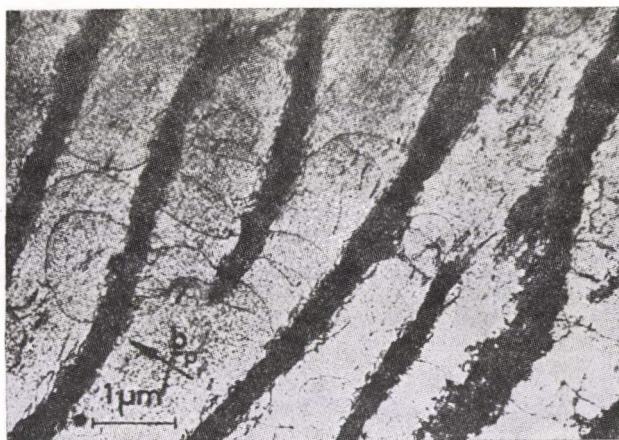
ahol n egy ilyen csoportban levő csavardiszlokációk száma. Az (5) és (6) összefüggések egybevetéséből azt kapjuk, hogy diszlokáció megsemmisülés csak akkor játszódik le, ha

$$\beta = \frac{2\gamma_{pl}h}{bn} = 1, \quad (7)$$

míg $\beta < 1$ esetben kioltás nem jöhet létre. Ez az egyszerű kritérium bármilyen helyi diszlokáció elrendeződésre alkalmazható, feltéve, hogy h és a helyi γ_{pl} deformáció ismert. Behelyettesítve a kísérleti értékeket ($h \approx 500 \text{ \AA}$ [4]), továbbá az 1. és 6. ábrák összehasonlításából meghatározott $\gamma_{pl,M}$ és $\gamma_{pl,PSB}$ értékeket, azt kapjuk a mátrixra, illetve az állandósult csúszási sávokra, hogy

$$\beta_M \approx 0,024 \quad (n = 1), \quad \text{illetve} \quad \beta_{PSB} \approx 1 \quad (n = 3). \quad (8)$$

A kapott eredményből arra következtethetünk, hogy a mátrixban nem jelentős a csavardiszlokációk megsemmisülése. Az állandósult csúszási sávok esetében az eredmény arra utal, a csavardiszlokációknak feltétlenül csoportokba kell rendeződniük (hozzávetőleg három azonos előjelű diszlokációnak). Ezt a következtetést a csavardiszlokációk csoportjainak feszültség alatti állapotban történő elektronmikroszkópos megfigyelései is megerősítik [12, 19], amint például a 9. ábrán is láthatjuk. A stacionárius diszlokáció fluxus fenntartása érdekében az állandósult csúszási sávokban valamilyen diszlokáció sokszorozódási mechanizmusnak is kell működnie ezzel egyidejűleg. A legvalószínűbbnek látszik, hogy a falakból kihajló éldiszlokáció szegmensek a kritikus Frank—Read sugarat túllépve leszakadnak. Bár ezek a szegmensek általában túl rövidek ahhoz, hogy egyedül a csúcsfeszültség hatására disz-



9. ábra. Ciklikusan telítésig deformált réz egykristálynak a primer csúszósíkkal párhuzamos metszetéről készült TEM-felvétel. $\gamma_{pl}, \gamma_{SB} \approx \gamma_{pl} = 5 \times 10^{-3}$

lokáció forrásokként működjenek, mégis lehetséges a forrás működése a fellépő hosszú hatótávolságú belső feszültségek segítségével [4, 12, 18, 19]. A 9. ábrán a fenti mechanizmus közvetlen bizonyítékát láthatjuk réz egykristály esetén, amikor a diszlokációkat neutron besugárzással rögzítették.

Bár a mátrixban található erezet szerkezetét újabban gyenge sugaras transzmissziós elektron mikroszkópiával vizsgálták [20, 21], még nincs közvetlen bizonyíték megbízható diszlokációs mechanizmusra az erezetekben. Ennek ellenére közismert, hogy a kismértékű képlékeny deformáció ($\gamma_{pl,M}$) az erezetekben lényegében a diszlokáció dipólok ide-oda mozgásával valósul meg, ami arra utal, hogy az erezetekben telítéskor sem diszlokáció sokszorozódás, sem megsemmisülés nem játszódik le.

Másrésről a következő megfigyelések azt jelzik, hogy az állandósult csúszási sávok esetén a fal szerkezet diszlokáció elrendezése folyamatos változásokon megy át. 1. A falakból éldiszlokációk hajlanak ki és így a falak környéke kuszává válik. 2. Az újonnan kialakult éldiszlokációkat a mozgó csavardiszlokációk a falakba sodorják. 3. Ponthibák gyűlnek össze nagy sűrűséggel, amelyeket inkább a falakban, mint a falak közötti csatornában lehet észlelni [20, 22]. Ez arra utal, hogy a falak 10^{15} – 10^{16} m^{-2} körüli nagy helyi diszlokáció sűrűsége [12, 20] miatt az éldiszlokációk megsemmisülésének [23] nagy a valószínűsége. Ezekkel az állandó változásokkal szemben valószínűtlennek tűnik, hogy a falak folyamatosan teljesen lerombolódjanak, majd újra felépüljenek, mivel a falakat, ellentétben az erezetekkel, kusza másodlagos diszlokációk stabilizálják.

A fő következtetés az, hogy az állandósult csúszási sávokban a lokalizált diszlokációs mechanizmus különböző folyamatok közötti dinamikus egyensúly eredménye. Ez arra utal, hogy a tárgyalt folyamatok statisztikus természete szerepet játszhat az állandósult csúszási sávok esetén a felületen létrejövő barázdáltság kialakulásában, amint azt a következő fejezetben látni fogjuk.

6. Ciklikusan alakított fémek felületi érdessége

A fásasztás során az alakítás előrehaladtával a minták felülete egyre növekvő mértékben érdessé válik, kiemelkedések és bemélyedések jönnek létre. *Cottrell és Hull* egy egyszerű mechanizmust javasolt a jelenség magyarázatára [24], amelyben két egymást átmetsző csúszósíkon egymást követően előre és hátra történő elcsúszásokból alakul ki a kristály felületén egy kiemelkedés-bemélyedés pár. *Laird és Duquette* megállapította [25], hogy kiemelkedés-bemélyedés párok egyetlen működő csúszási rendszer esetén is létrejönnek, és nem feltétlenül biztos, hogy a kiemelkedések és a bemélyedések minden esetben párokat alkotnak [26]. *Neumann* úgy találta [27], hogy a

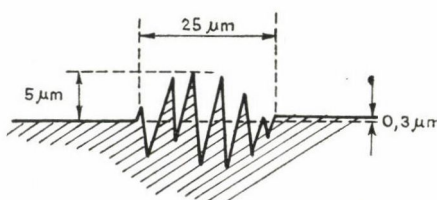
kiemelkedéseket vagy bemélyedéseket diszlokációs lavina alakítja ki, párhuzamosan haladva a közeli csúszósíkkal, amely elentétes előjelű diszlokáció feltorlódásokat tartalmaz.

Thompson, Wadsworth és Louat azt találták, hogy a felületi érdesség az állandósult csúszási sávokkal kapcsolatos [3], a kiemelkedések és bemélyedések azok mentén jelennek meg. *Finney és Laird* interferometriás módszerrel meghatározta réz egykristályok felületi profilját az állandósult csúszási sávok közelében [11]. Ered-

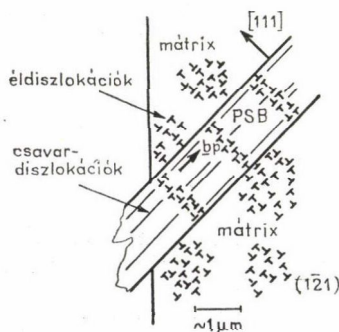
ményük a 10. ábrán látható. Az állandósult csúszási sáv némileg ($\approx 0,3 \mu\text{m}$) kiemelkedik a felületből, de $5 \mu\text{m}$ körüli éles hegyeket és völgyeket is találhatunk a sávban.

Essmann, Gösele és Mughrabi az állandósult csúszási sávok esetén megismert diszlokációs elrendezés és mechanizmus segítségével modellet dolgozott ki a fásasztott fémek kiemelkedéseinek és bemélyedéseinek kialakulási mechanizmusáról [28].

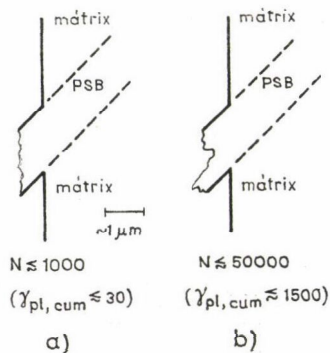
A továbbiakban az ő modelljüket ismertetjük. A 11. ábrán láthatjuk vázlatosan a mátrix és az állandósult csúszási sávok diszlokáció elrendeződését, amint az állandó-



10. ábra. A felület vázlatos ábrázolása állandósult csúszási sáv közelében réz esetén. A réz egykristályt $\gamma_{pi} = 2,5 \times 10^{-3}$ képlékeny deformáció mellett 30 000 ciklusig fásasztották [11]



11. ábra. A diszlokáció elrendeződés vázlatos ábrázolása a felület közelében. Az állandósult csúszási sáv (PSB) kiemelkedik a felületből



12. ábra. Az állandósult csúszási sáv (PSB) felületi profilja a fásztóvízvizsgálat kezdeti (a) és későbbi (b) szakaszában

sult csúszási sáv kiemelkedik a felületen. Az ábra az $(\bar{1}\bar{2}1)$ síkmetszetet mutatja, amely tartalmazza a $b_p = \frac{1}{2} [\bar{1}01]$ primer Burgers vektort és merőleges az (111) primer csúszósíkra. A primer éldiszlokációk $[\bar{1}\bar{2}1]$ iránya merőleges a rajz síkjára. A diszlokáció elrendeződések megfelelnek a 2. fejezetben leírtaknak. Meg kell jegyezni, hogy a 11. ábrán látható szerkezet leegyszerűsített, mivel semmilyen utalást nem tartalmaz a következő két fontos részletre. Az egyes dipólok, amelyekből a falak felépülnek, tisztán különböznek egymástól, azaz a dipólok közti távolság jelentősen nagyobb, mint az átlagos dipól szélesség [21, 29], továbbá a dipólok valószínűleg túlnyomórészt vakancia-típusúakból épülnek fel [21, 30]. *Essmann* és *munkatársai* modelljének alapvető gondolata az, hogy a falakban levő keskeny éldiszlokáció dipólok megsemmisülésekor ponthibák, főként vakanciák keletkeznek, amelyek egészen egy telítési vakancia-koncentráció eléréséig növelik az állandósult csúszási sávok térfogatát, ami kiemelkedésekhez vezet ott, ahol ezek elérik a felületet. *Essmann* statisztikus számításai [31] azt mutatták, hogy a falakban hozzávetőlegesen minden diszlokáció egyszer cserélődik ki minden 15 ciklus alatt, és a keletkező ponthibák atomi koncentrációja ciklusonként $c \approx 4,3 \times 10^{-5}$, ami azt jelenti, hogy kb. 65 ciklus alatt keletkezik annyi vakancia, amennyi eléri a telítődést. Ennek érdekes következménye, hogy a felületi kiemelkedések a kezdeti egyenletes felületről a fárasztási vizsgálat előrehaladtával egyenletlen, éles csúcokat és mély bevágásokat mutató alakra változnak, amint ezt a 12. ábra mutatja. Ennek az az oka, hogy a telítési vakanciakoncentráció elérése után az állandósult csúszási sávok relatív térfogata már nem változik tovább, viszont másodlagos effektusként felületi átrendeződéssel járó diszlokáció csúszások indulnak meg, amelyek az állandósult csúszási sávok és a mátrix határán levő geometriailag szükséges diszlokációk elrendeződését úgy változtatják meg, hogy azok rugalmas energiája minimális legyen [28].

7. Ötvözetek, polikristályos fémek fárasztása

Az eddigiek alapján jogosan merülhet fel az az alapvető kérdés, hogy vajon az állandósult csúszási sávok megjelenése mennyire általános jelenség a fárasztott fémekben és ötvözetekben. Mivel az állandósult csúszási sávok dinamikus egyensúlyában, nevezetesen a diszlokáció dipólok megsemmisülésében a keresztcsúszásnak nagy szerepe van, ami magas rétegződési-hiba energiát kíván, így érthető, hogy az alacsony rétegződési-hiba energiájú szilárd oldat állapotú ötvözetekben, illetve a tércentrált köbös fémekben nem észlelhetünk állandósult csúszási sávokat [8]. Másrésről *Kwadjo* és *Brown* munkája alapján [32] megállapíthatjuk, hogy a szoros illeszkedésű hexagonális fémekben az (fck) fémekhez hasonló tulajdonságú állandósult csúszási sávok jöhetnek létre, amint ezt fárasztott magnézium egykristály mintákon végzett vizsgálataikkal megállapították.

Átvágható kiválásokat tartalmazó, öregített, (fck) fémek egy másik, némileg különböző osztályát képezik az anyagoknak, amelyek nagyon érzékenyek a helyi deformációkra az állandósult csúszási sávhoz hasonló tartományokban. Jellemző ezekre az „állandósult csúszási sávokra”, hogy kialakulásuk ciklikus lágyulással jár együtt a telítés későbbi elérése nélkül [8]. A ciklikus lágyulás a kiválásokon keményített mikroszerkezet folyamatos megszűnésével kapcsolatos, a kiválások az ismétlődő

diszlokáció átmetszések hatására részekre töredeznek, amelyek eltávolodnak egymástól közelítve a szilárd oldat állapotot, amint például *Wilhelm* öregített Cu—Co és Al—Zn—Mg ötvözetek vizsgálatakor megállapította [33].

Polikristályos fémekben a legújabb megfigyelések szerint állandósult csúszási sávok az anyag belső szemcséiben is létrejönnek [6, 34]. Lényeges különbség van azonban a felületi és tömb fázisbeli csúszási sávok között [35]. A felületi szemcsékben ugyanis a megfelelően orientált csúszósíkokon képződő állandósult csúszási sávokban a határdiszlokációk elhagyják a szemcsét és ezáltal feszültségmentesítik a szemcsehatárt. A belső szemcsékben keletkező állandósult csúszási sávok, vagy ahol a sáv párhuzamos a minta felületével, a szemcsehatár megakasztja a csúszási sávot és a határon így felhalmozódó feszültség miatt határmenti törés jöhet létre. A polikristályos anyagok ciklikus feszültség-deformáció görbéjén általában nem jelenik meg az egykristályok esetén megfigyelt plató (B tartomány) [7, 28, 34, 35].

A kísérleti eredményekkel jó egyezést adó modellt alkothatunk, ha figyelembe vesszük, hogy a ciklikus alakítás során az alakváltozás egyszeres csúszással történik, vagyis egy szemcsén belül az állandósult csúszási sávok párhuzamosak egymással. Ezt valószínűleg egy latens keményedés okozza, amely miatt az első csúszási rendszer aktiválódása után a többi csúszási rendszer folyásfeszültsége négy-ötszörösére nő [35]. Így a polikristály alakváltozására a *Sachs* modellt [36] kell alkalmazni. Nagyobb térfogatarányú állandósult csúszási sáv jelenlétében a modellből azt kapjuk, hogy a ciklikus nyújtás során a feszültség

$$\sigma_s = m\tau_b + 2,02G\alpha\epsilon_p, \quad (9)$$

ahol $m=2,24$, a *Sachs*-modellből következő effektív orientációs faktor, τ_b az egykristály esetén a ciklikus feszültség-deformációs görbe platófeszültsége, α a csúszási sáv alakjától függő feszültség akkomodációs faktor. Látható tehát, hogy bár a ciklikus nyúlást a polikristályok esetén is az állandósult csúszási sávok folyásfeszültsége szabja meg, a σ_s értéknek nincs vízszintes szakasza. Az egykristályoktól való eltérést az okozza, hogy polikristályokban a szemcsehatárok korlátozzák az egyes csúszási sávoknak a teljes mintára való kiterjedését.

8. Összefoglalás

A dolgozatban a felületcentrált köbös fémekben ciklikus alakítás során létrejövő állandósult csúszási sávok tulajdonságait vizsgáltuk. Megállapítottuk, hogy egykristályok esetén, ha a ciklikus deformáció egy kritikus $\gamma_{pl,M}$ küszöbértéket meghalad, akkor a mintában megkezdődik az állandósult csúszási sávok nukleációja. Ekkor a deformációt tovább növelve a minták ciklikus telítési feszültsége nem változik egészen addig, míg a kristály teljes térfogatát el nem foglalják az állandósult csúszási sávok.

Vizsgáltuk a mátrix és az állandósult csúszási sávok szerkezetét, továbbá a deformációs folyamatok mechanizmusait. Megállapítottuk, hogy a deformáció mind a mátrixban, mind az állandósult csúszási sávokban főleg a diszlokációszegény csatornáknak történik azzal a különbséggel, hogy a mátrixban a diszlokációk reverzibilisen előre-hátra mozognak, míg az állandósult csúszási sávokban a diszlokációmozgás irreverzibilis. Ekkor a stacionárius alakváltozás a diszlokációk megsemmisülésének és újraképződésének dinamikus egyensúlyával írható le.

Megvizsgáltuk a ciklikusan alakított fémek felületi érdességének a jelenségét. Azt találtuk, hogy a felületen az állandósult csúszási sávok kiemelkedését az okozza, hogy a falakban levő, főleg vakancia-típusú diszlokáció dipólok megsemmisülésekor ponthibák (vakanciaiák) kerülnek az anyagba, ami az állandósult csúszási sávok relatív térfogat növekedésével jár. Bemutattunk egy diszlokáció csúszás és diszlokáció megsemmisülés mechanizmusra épülő modellt, amely megmagyarázza a felületi kiemelkedések létrejöttét.

Végül megvizsgáltuk, hogy az állandósult csúszási sávok milyen módon jelennek meg szilárd oldat állapotú vagy kiválásos ötvözetekben, illetve polikristályos fémekben. Megállapítottuk, hogy bizonyos megkötések mellett a ciklikus alakváltozásoknak általános velejárója az állandósult csúszási sávok megjelenése.

IRODALOM

1. J. A. Ewing and J. C. W. Humfrey, *Phil. Trans. Roy. Soc.* 200, 241, 1903.
2. M. S. Hunter and W. G. Fricke, *Proc. ASTM*, 54, 717, 1954.
3. N. Thompson, N. J. Wadsworth and N. Louat, *Phil. Mag.* 1, 113, 1956.
4. H. Mughrabi, F. Ackerman and K. Herz, *Fatigue Mechanisms*, Proc. of ASTM—NBS—NSF Symposium, Kansas City, Mo., May 1978. ed. J. T. Fong, ASTM—STP 675, 1979. p. 69.
5. K. Pohl, P. Mayr and E. Macherauch, *Scripta Met.* 14, 617, 1980.
6. A. T. Winter, O. B. Pedersen and K. V. Rasmussen, *Acta Met.* 29, 735, 1981.
7. O. B. Pedersen, K. V. Rasmussen and A. T. Winter, *Acta Met.* 30, 57, 1982.
8. H. Mughrabi, *Strength of Metals and Alloys*, ed. P. Haasen, Vol. 3. Pergamon Press, Oxford, 1980. p. 1615.
9. P. J. Woods, *Phil. Mag.* 28, 155, 1973.
10. A. T. Winter, *Phil. Mag.* 30, 719, 1974.
11. J. M. Finney and C. Laird, *Phil. Mag.* 31, 339, 1975.
12. J. C. Grosskreutz and H. Mughrabi, *Constitutive Equations in Plasticity*, ed. A. S. Argon, MIT Press Cambridge, Mass. 1975. p. 251.
13. D. F. Watt, J. D. Embury and R. K. Ham, *Phil. Mag.* 17, 199, 1968.
14. H. Mughrabi, *Mat. Sci. Eng.* 33, 207, 1978.
15. W. N. Roberts, *Phil. Mag.* 20, 675, 1969.
16. O. Helgeland, *J. Inst. Met.* 93, 570, 1964/65.
17. G. Masing, *Zeitschr. f. tech. Physik* 6, 569, 1925.
18. H. Mughrabi, *Continuum Models of Discrete Systems* 4, eds. O. Brulin and R. K. T. Hsieh, Nort-Holland, Amsterdam, 1981. p. 241.
19. H. Mughrabi, *Proc. of 3rd Int. Con. on the Strength of Metals and Alloys*, Cambridge, U.K. 1973. p. 407.
20. J. G. Antonopoulos and A. T. Winter, *Phil. Mag.* 33, 87, 1976.
21. J. G. Antonopoulos, L. M. Brown and A. T. Winter, *Phil. Mag.* 34, 549, 1976.
22. J. Picqueras, J. C. Grosskreutz and W. Frank, *Physica Status Solidi (a)*, 11, 567, 1972.
23. U. Essmann and M. Rapp, *Acta Met.* 21, 1305, 1973.
24. A. H. Cottrell and D. Hull, *Proc. Roy. Soc. A242*, 211, 1957.
25. C. Laird and D. J. Duquette, *Corrosion Fatigue*, eds A. J. McEvily and R. W. Staehle, NACE—2, Houston, 1972. p. 88.
26. P. Lukas, M. Klesnil and J. Krejci, *Phys. Stat. Sol.* 27, 545, 1968.
27. P. Neumann, *Acta Met.* 17, 1219, 1969.
28. U. Essmann, U. Gösele and H. Mughrabi, *Phil. Mag.* 44, 405, 1981.
29. M. Wilkens, K. Herz and H. Mughrabi, *Z. Metallk.* 71, 376, 1980.
30. L. M. Brown, *Met. Sci.* 11, 315, 1977.
31. U. Essmann, *Phil. Mag.* 45, 171, 1982.
32. R. Kwadjo and L. M. Brown, *Acta Met.* 26, 1117, 1978.
33. M. Wilhelm, *Mater. Sci. Engng.* 48, 91, 1981.
34. S. P. Bhat and C. Laird, *Scripta Met.* 12, 687, 1979.
35. P. Lukas and M. Klesnil, *Mater. Sci. Engng.* 11, 345, 1973.
36. Kovács I., *Magyar Fizikai Folyóirat*, 33. 409 (1985).

3. ALAKVÁLTOZÁS TÖBBFÁZISÚ RENDSZEREKBEN

LENDVAI JÁNOS

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOM

1. Bevezetés	393
2. Merev részecskéket tartalmazó ötvözetek alakváltozása	395
2.1. Geometriailag szükséges diszlokációk sűrűségének meghatározása	395
2.2. Diszlokációszerkezet 3 dimenziós, merev részecskéket tartalmazó kristályban	397
2.3. A geometriai diszlokációszerkezet stabilitása	399
2.4. A geometriai diszlokációszerkezet kialakulásának mechanizmusa	400
2.5. Merev részecskéket tartalmazó kristályok alakítási keményedése	402
3. Alakváltozás átvágható részecskéket tartalmazó ötvözetekben	406
4. Összefoglalás	407

1. Bevezetés

Kedvező mechanikai tulajdonságaik miatt a többfázisú anyagokat egyre kiterjedtebben alkalmazzák. Ezen anyagok alakváltozása számos szempontból különbözik az egyfázisú rendszerektől. A különbségek oka alapvetően a komponensek eltérő szilárdsági és alakítási tulajdonságaiban rejlik.

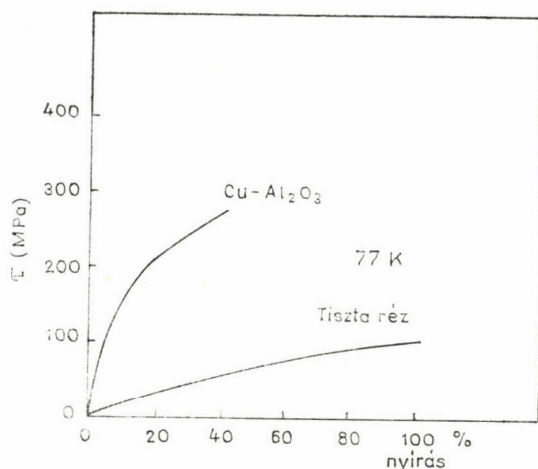
Többfázisú anyagokat előállíthatunk öntéssel, hőkezeléssel, belső oxidációval és „mesterséges” úton (pl. porkohászati módszerekkel, szálerősítéssel anyagok készítésével stb.). A deformáció mechanizmusa szempontjából természetesen nem az előállítás módja, hanem sokkal inkább az anyagot alkotó fázisok szerkezete és tulajdonságai, valamint a fázisok elhelyezkedése, elosztása, alakja és mérete a lényeges. Így például egy irányított kristályosítással megszilárduló eutektikus ötvözet mechanikai szempontból nagyon hasonló lehet egy szálerősítéssel anyaghoz, vagy egy nemesítő hőkezeléssel kialakított kiválós szerkezetben az alakváltozás végbemehet ugyanolyan mechanizmussal, mint egy belső oxidációval vagy porkohászati módszerrel előállított anyagban. A deformáció eltérő módon megy végbe, ha az anyagot alkotó fázisok egymás mellett helyezkednek el (irányítottan megszilárduló eutektikum, szálerősítéssel anyag), illetve ha az egyik fázis *részecskéit körülveszi* a másik fázis.

Ötvözetek esetén az idegen fázisú részecskékkel történő szilárdságnövelést igen széles körűen alkalmazzák, ezért mi is ezzel foglalkozunk részletesen. Az alkalmazások szempontjából lényeges esetekben a második fázis részecskéinek térfogati hányada néhány százalék, a részecskék jellemző mérete 1–100 nm, átlagos távolságuk 10–500 nm. Az idegen fázisú részecskéket diszperz eloszlásban tartalmazó ötvözet folyáshatára a tiszta anyaghoz viszonyítva jelentősen megnőhet. A képlékeny alakváltozás megindításához szükséges küszöb feszültség meghatározásához egy diszlokációnak a részecskékkel való kölcsönhatását kell leírunk. A részecskék tulajdonsá-

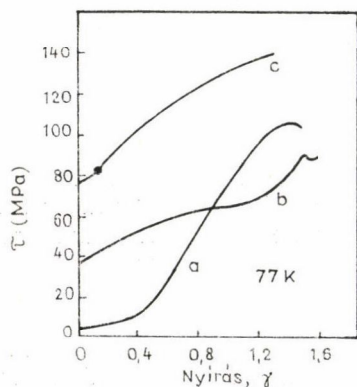
gaitól és a mátrixhoz való krisztallográfiai illeszkedésüktől függően különböző folyamatok játszódhatnak le. A két határeset a mátrixhoz tökéletesen koherensen illeszkedő, illetve a merev, inkoherens részecskék esete. A küszöbfeszültség, illetve a folyáshatár elméletét ezekre az esetekre egy korábbi dolgozatban összefoglaltuk [1].

Ebben a dolgozatban a második fázisú részecskéket tartalmazó rendszerek alakváltozási folyamataira és alakítási keményedésére vonatkozó ismereteket tekintjük át. Ehhez *több* diszlokációnak a részecskékkel és egymással való kölcsönhatását kell figyelembe venni. A folyáshatár elméletének tárgyalásához hasonlóan célszerű most is külön vizsgálni a merev, inkoherens, illetve a koherens, átvágható részecskék esetét.

Nem deformálódó, inkoherens részecskéket tartalmazó ötvözet alakításakor a képlekeny alakváltozás eloszlásában jelentős inhomogenitások lépnek fel. Ha a részecskék közötti távolság kicsi, akkor a körülöttük kialakuló deformáció-gradiensek következtében gyors és a tiszta mátrixét nagy mértékben meghaladó alakítási kemé-



1. ábra. Tiszta réz és Al_2O_3 részecskéket tartalmazó réz egykristály alakítási görbéje



2. ábra. Cu—Co ötvözet egykristály feszültség-deformáció görbéi a) Cu—O, 6 at% Co szilárd oldat, b) Cu-lat% Co, koherens részecskék, $f=0,66\%$, $r=10$ nm; c) Cu—3 at% Co, koherens részecskék, $f=2,7\%$, $r=10$ nm

nyedés figyelhető meg (1. ábra) [2]. A koherens, átvágható részecskéket tartalmazó anyagban ezzel szemben az alakváltozás eloszlása egyenletesebb, ennek megfelelően az alakítási görbe jobban hasonlít az egyfázisú anyag (szilárd oldat) görbéjéhez (2. ábra) [3].

2. Merev részecskéket tartalmazó ötvözetek alakváltozása

Ha egy kétfázisú anyagban az egyik fázis nem szenved maradó alakváltozást vagy a maradó alakváltozás kisebb, mint a másik fázisban, akkor ez az anyag képlékenyen inhomogén. Az inhomogén rendszerekben a véletlenszerűen tárolt diszlokációkon kívül (ezek ugyanolyan statisztikus módon rögzítődnek, mint a homogén anyagokban) a deformáció kompatibilitásának megőrzéséhez egy többlet diszlokációsűrűség kialakulása szükséges [4, 5, 6]. A többlet diszlokációk száma és eloszlása geometriai megfontolások alapján megadható, ezért ezeket geometriailag szükséges, vagy rövidebben geometriai diszlokációknak, míg a véletlenszerűen tárolt diszlokációkat statisztikus diszlokációknak nevezzük [4, 5].

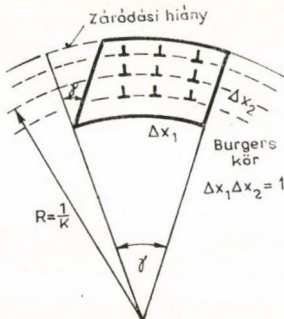
2.1. Geometriailag szükséges diszlokációk sűrűségének meghatározása [5]

A geometriai diszlokációsűrűség bizonyos esetekben igen egyszerűen meghatározható. A 3. ábrán egy egyszeres csúszással nyírózó, meghajlított kristály kicsiny darabjának metszetét láthatjuk. Az ábrán feltüntetett egységnyi felületű Burgers-kör záródási hiánya a kristálysíkok görbületével egyenlő, mivel

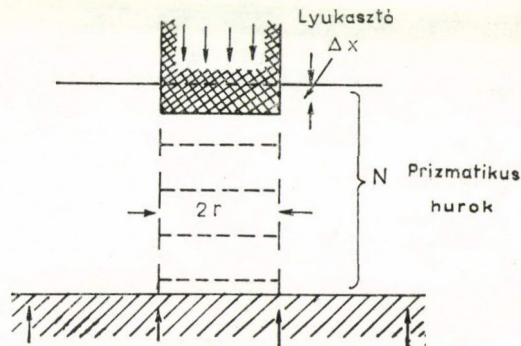
$$\gamma \Delta x_2 = \frac{\Delta x_1}{R} \Delta x_2 = \frac{1}{R}. \quad (1)$$

A kristály ilyen görbületre történő képlékeny hajlítása tehát megvalósítható, ha a geometriai diszlokációsűrűség

$$\rho^G = \frac{1}{Rb}, \quad (2)$$



3. ábra. Geometriailag szükséges diszlokációk képlékenyen hajlított kristályban



4. ábra. Geometriailag szükséges prizmatikus diszlokációhurkok Delta x mélységig behatolt lyukasztó tűske előtt

ahol b a diszlokációk Burgers-vektorának abszolút értéke. A 3. ábrán látható diszlokáció eloszlással nem keletkeznek hosszú távú feszültségek, azaz a belső feszültségeket a diszlokációk átlagos távolságához viszonyítva nagy méretű tartományra átlagolva nulla adódik.

Második példaként tekintsük a 4. ábrán látható benyomódás esetét, amikor a lyukasztó tűske Δx mélységig hatolt be az anyagba. A Δx képlékeny összenyomódást minimális belső feszültségek mellett $N = \Delta x/b$ prizmatikus diszlokációhurok segítségével lehet létrehozni.

A geometriai diszlokációsűrűség és a képlékeny nyírás gradiensei között egyszerű összefüggést állapíthatunk meg. Az 5. ábrán egy egyszeres csúszással nyíródo kristály inhomogén deformációját szemléltettük. Osszuk fel a kristály metszetét $\Delta x_1 \cdot \Delta x_2$ méretű cellákra (5a. ábra). Az α csúszási rendszerbeli nyírási gradiens következtében az egyes cellák különböző mértékű alakváltozást szenvednek, így ha az anyag nem lenne folytonos, akkor az 5b. ábrán szemléltetett helyzet alakulna ki. A szomszédos cellák nyírási deformációjának különbségét a következőképpen írhatjuk fel:

$$\Delta \gamma = \frac{\partial \gamma}{\partial x_1} \Delta x_1. \quad (3)$$

Az egyes cellák deformációját létrehozhatja az 5b. ábrán látható diszlokáció eloszlás, amely diszlokáció dipóloknak a cellahatárokig történő szétválásával alakul ki. Egy cellában a dipólók száma

$$n = \frac{\gamma \Delta x_2}{b}. \quad (4)$$

Újra egyesítve a cellákat (5c. ábra) a szomszédos cellák felületén elhelyezkedő ellentétes előjelű diszlokációk megsemmisítik egymást. Az ellentétes előjelű diszlokációk száma azonban a nyírási gradiens következtében nem egyenlő és így a cellák határfelületén fennmaradnak nem kompenzált diszlokációk Δn számára a következő összefüggést írhatjuk fel:

$$\Delta n b = \Delta \gamma \Delta x_2 = \frac{\partial \gamma}{\partial x_1}. \quad (5)$$

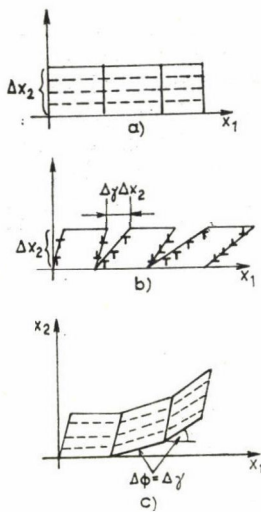
A geometriai diszlokációsűrűségekre tehát a

$$\rho^G = \frac{1}{b} \frac{\partial \gamma}{\partial x_1} \quad (6)$$

egyenlet adódik.

Az 5. ábrából az is látható, hogy a nyírási gradiens következtében a kristálysík elfordulnak. A kristálysík elfordulási szöge az ábra alapján:

$$\Delta \Phi = \arctg \Delta \gamma \simeq \Delta \gamma. \quad (7)$$



5. ábra. Geometriai diszlokációk nyírási alakváltozásokor

A kristálysíkok görbületét a következőképpen adhatjuk meg:

$$K = \frac{\partial \Phi}{\partial x_1} = \frac{\partial \gamma}{\partial x_1} \quad (8)$$

és így a (6) egyenletet felhasználva

$$K = \rho^G b, \quad (9)$$

ami megegyezik a meghajlított kristály példájában kapott (2) összefüggéssel.

Az eddigiekben tiszta anyagok inhomogén alakváltozásainál határoztuk meg a geometriai diszlokációk sűrűségét. Egy tiszta kristály képlékeny hajlításakor nem csak geometriai, hanem statisztikus diszlokációk is felhalmozódnak az anyagban és mivel a görbület általában nem lehet nagy, a statisztikus diszlokációk dominálnak. Más a helyzet egy képlékenyen inhomogén kétfázisú rendszerben, amelyben az egyik fázis γ_1 nyírással deformálódik, míg a másik fázis deformálatlan marad ($\gamma_2=0$). Ekkor a két fázis egymáshoz viszonyított elfordulása a (7) összefüggés alapján

$$\Phi = \arctg \gamma_1 \simeq \gamma_1 \quad (10)$$

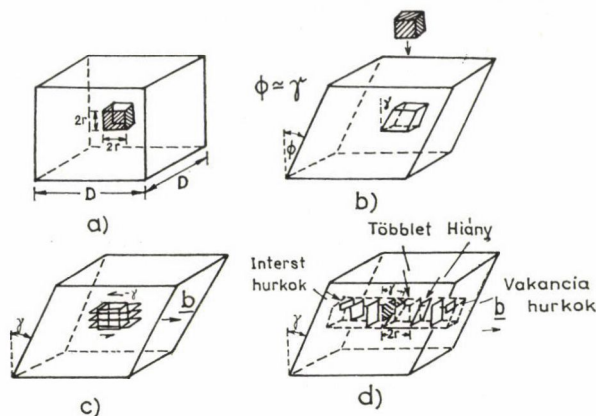
és a két fázis határán, ahol a nyírási gradiens nagy, a geometriai diszlokációsűrűség is jelentős lehet.

2.2. Diszlokációszerkezet 3 dimenziós, merev részecskéket tartalmazó kristályban

Erős, nehezen deformálható vagy merev részecskéket tartalmazó kristályban a deformáció már a képlékeny alakváltozás megindulásakor inhomogén. A részecskékben és a mátrixnak a részecskékhez közeli, azokhoz erősen kötődő rétegeiben nem lépnek fel elcsúszások akkor, amikor a részecskéktől távol a csúszás már jelentős lehet. A részecskék közelében tehát nagy deformáció-gradiensek alakulnak ki és ennek megfelelően a részecskék körül geometriailag szükséges diszlokációk halmozódnak fel. A geometriai diszlokációszerkezet biztosítja a deformáció kompatibilitásának (az anyag folytonosságának) fenntartását úgy, hogy a belső feszültség az anyagban se haladja meg a lokális folyáshatárt. A lokális folyáshatár, ami lehet sokkal nagyobb, mint az anyag makroszkopikus folyáshatára, az a feszültség, amelynél egy alacsonyabb energiájú diszlokáció elrendeződés nukleálódhat. Így ez lehet például a keresztcsúszás megindulásához szükséges feszültség vagy az a feszültség, amelynél egy új csúszási rendszer aktiválódik.

A geometriailag szükséges diszlokációk hálózatán kívül természetesen kialakul az anyagban a statisztikusan tárolt diszlokációszerkezet is. A következőkben bemutatjuk a geometriai diszlokációszerkezet meghatározásának módszerét, majd megvizsgáljuk a geometriai és a statisztikus diszlokációk sűrűségének arányát, valamint szerepüket a részecskéket tartalmazó kristály alakítási keményedésében.

Legegyszerűbb példaként vizsgáljuk meg egy kocka alakú merev részecskét tartalmazó kocka alakú kristály képlékeny nyírását (6. ábra). Az alakváltozást a következő modell-folyamattal valósíthatjuk meg. Kivesszük a részecskét a kristályból, amelyet ezután homogén módon γ nyírással deformálunk (6b. ábra). Ezt követően a deformálatlan, kocka alakú részecskét visszahelyezzük a helyén maradt üregbe. Ehhez azonban az üreget előbb vissza kell alakítani az eredeti alakjára. Ez úgy való-



6. ábra. Egyenlőtengelyű, merev részecskét tartalmazó kristály képlékeny nyírása során kialakuló csúszási (c) és prizmatikus (d) diszlokációhurok

sítható meg, hogy a mátrixnak az üreget közvetlenül határoló részét $-\gamma$ nyírással deformáljuk. Az ehhez szükséges elmozdulásokat a 6c. ábrán nyilakkal jelöltük. Ezek az elmozdulások létrehozhatók a részecskét körülvevő n darab nyírási diszlokációhurok segítségével, amint azt a 6c. ábrán láthatjuk. Egyszerűen megadhatjuk a szükséges nyírási hurkok számát:

$$n = \frac{2r\gamma}{b}, \quad (11)$$

ahol $2r$ a részecske mérete, b a Burgers-vektor abszolút értéke.

A másik lehetőség az üreg alakjának visszaállítására prizmatikus diszlokációhurok sorozatok létrehozása (6d. ábra), amelyek a megfelelő helyeken elvesznek, illetve hozzátesznek anyagot az üreghez. A 6d. ábrán az üreg bal oldalán vonalkázva látható az a ΔV térfogat, ahonnan anyagot kell eltávolítani. Ha a részecske térfogata V_p , akkor

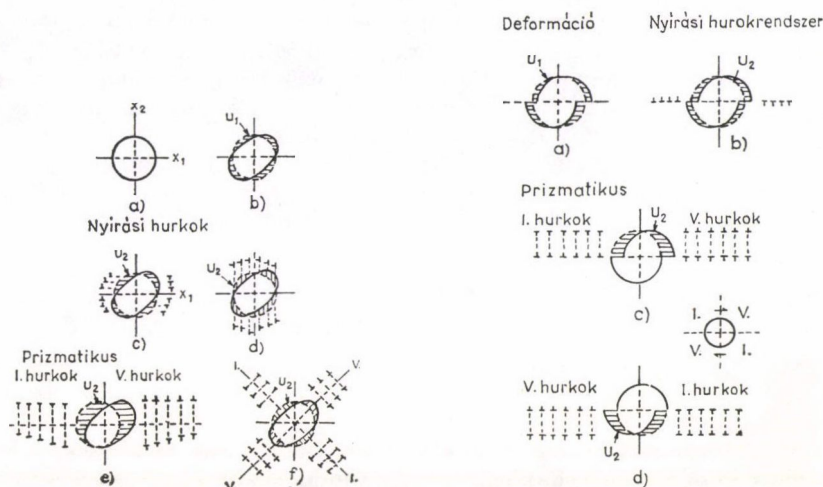
$$\Delta V = \frac{1}{2} V_p \gamma. \quad (12)$$

A ΔV térfogatban levő anyagot olyan intersticiális prizmatikus hurkok segítségével helyezhetjük el a mátrixban, melyeknek Burgers-vektora megegyezik az eredeti nyírási hurkokéval. A részecske túloldalán ugyanekkora ΔV térfogatot kell anyaggal kitölteni. Az ehhez szükséges mátrix anyagot vakancia típusú prizmatikus hurkok segítségével nyerhetjük.

Ha most is, mint a csúszási hurkok esetén, minden elmozdulást maradónak tekintünk, akkor megbecsülhetjük a részecske körül szükséges vakancia és intersticiális típusú prizmatikus hurkok számát. A hurkok területe, amint az az ábrán is látható, változik, átlagos területük közelítőleg $2r^2$. Így a prizmatikus hurkok száma:

$$n_p = \frac{V_p \gamma}{2r^2 b} = \frac{4r\gamma}{b}. \quad (13)$$

A 7. ábrán gömb alakú üreg egyenletes nyírási alakváltozását (7a. és 7b. ábra) és az eredeti alakra visszavezető nyírási diszlokáció hurkokat (7c. és d. ábra), illetve prizmatikus diszlokáció hurkokat (7e. és f. ábra) láthatjuk. Megállapíthatjuk, hogy mind nyírási, mind prizmatikus hurkok esetén elvileg többféle elrendezés lehetséges. Később látni fogjuk, hogy ezek közül általában az figyelhető meg, amelyik könnyebben nukleálódik az alakváltozás során.



7. ábra. Gömb alakú üreg homogén deformációja (a, b), két csúszási (c, d) és két prizmatikus (e, f) hurokrendszer, amelyek visszaállítják az eredeti alakot

8. ábra. Egyetlen aktív csúszósíko átmetsző részecske (a) körüli geometriailag szükséges nyírási, illetve prizmatikus hurokrendszerek (b), illetve (c) és (d)

A kezdeti képlékeny alakváltozás eloszlása a valóságban általában nem olyan egyenletes, mint ahogy azt a fenti két egyszerű példánál (6. és 7. ábra) feltételeztük. A nyírás általában a részecske által átmetszett egy vagy két csúszósíkban történik, amint azt a 8a. ábrán láthatjuk gömbalakú üreg esetén. Az eredeti alakra visszatranszformáló nyírási, illetve prizmatikus hurok rendszereket a 8b., illetve a 8c. és d. ábrákon láthatjuk. A csúszási hurkok számát egy átlagos részecskénél ilyenkor is a (11) egyenlet adja, a prizmatikus hurkok számának meghatározására is lényegében alkalmazható az előzőekben ismertetett gondolatmenet, csupán a (12) összefüggésben szereplő $1/2$ -es faktor értéke módosul gömbalakú részecskék esetén. A 8c. és d. ábrákon látható, hogy vakancia (V), illetve intersticiális (I) hurkok a részecske mindkét oldalán kialakulhatnak.

2.3. A geometriai diszlokációszerkezet stabilitása

Vizsgáljuk meg, hogy milyen mértékű lokális nyírófeszültségek alakulnak ki a deformáció során. Az n darab csúszási diszlokációhurok esetén a lokális nyírófeszültség közelítőleg $n(Gb/2r)$ [7, 8], azaz a (11) egyenlet alapján körülbelül $G\gamma$ nyírófeszültség hat a részecskére és az azt körülvevő mátrixra. A deformáció növekedtével a ré-

szecskére ható feszültség nő és előfordulhat, hogy a kezdetben merevként viselkedő részecskében is megindul az alakváltozás [7, 9]. Gyakoribb azonban, hogy a részecske merev marad, ekkor a mátrix lokális folyáshatára korlátozza a keletkező nyírási diszlokációhurok számát. A lokális folyáshatár nem haladhatja meg a kristály elméleti folyáshatárát ($\sim G/30$) [10], ami azt jelenti, hogy csak csúszási diszlokációhurokat feltételezve a részecske körül, a nyírási deformáció nem lehet nagyobb, mint 3%. Valójában a lehetséges deformáció még ennél is kisebb, mivel a részecske-mátrix határfelületen már $G/100$ feszültségnél új diszlokációk nukleálódhatnak [11, 12] és már ennél alacsonyabb feszültségértékeknél felléphet keresztcsúszás [13, 14]. Megállapíthatjuk tehát, hogy nyírási diszlokációhurok rendszer esetén már $\gamma \approx 1\%$ deformációknál a $G\gamma$ lokális feszültség meghaladja a lokális folyáshatárt, ez a rendszer tehát legfeljebb 1% nyírási deformációkig maradhat fenn.

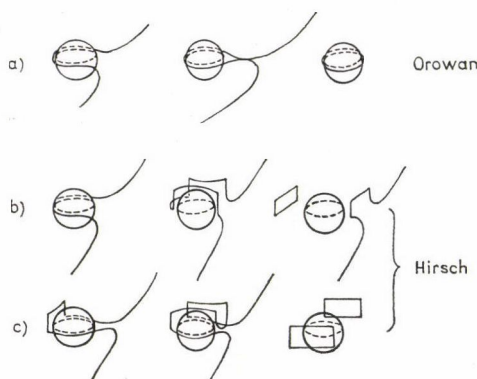
Prizmatikus hurok esetén a deformáció lényegesen nagyobb lehet, anélkül, hogy a belső feszültség elérné a lokális folyáshatárt. A nyírófeszültség a részecske felületén például a 8c. ábrán látható elrendezés esetén a huroksorozat tengelyével 45 fokos szöget bezáró síkokban a legnagyobb [5]:

$$\tau = Gf\gamma, \quad (14)$$

ahol f a részecskék térfogati hányada. Ismét $G/100$ -nak feltételezve a lokális folyáshatárt a nyírási deformáció maximális értékére $10^{-2}/f$ adódik. Ez azt jelenti, hogy 5–10% térfogati hányad mellett 10–20% nyírási deformációkig stabil a prizmatikus diszlokációhurok sorozat. Nagyobb deformációknál a belső feszültség először az eredeti huroksorozat tengelyével 45 fokos szöget bezáró síkokban éri el a lokális folyásfeszültséget. Ezekben a síkokban csúszások indulnak meg az elsődleges Burgersvektortól különböző Burgers-vektorokkal és a 7. ábrán látható elrendezések szuperpozíciója alakul ki [15, 16].

2.4. A geometriai diszlokációszerkezet kialakulásának mechanizmusa

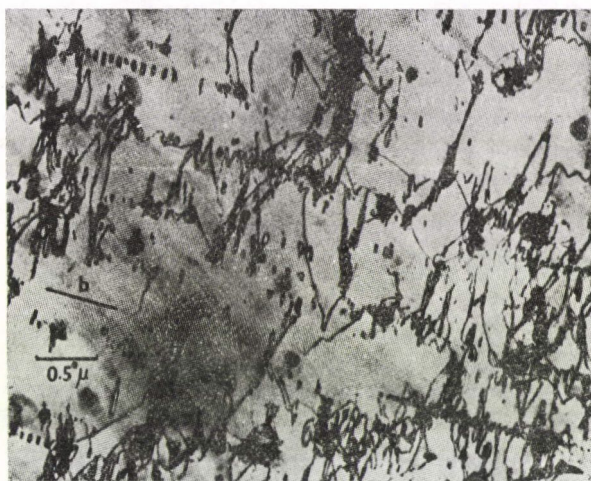
A 2.2. fejezetben megállapítottuk, hogy milyen diszlokációszerkezet szükséges a deformáció kompatibilitásának biztosításához egyenlőtengelyű, merev részecskéket tartalmazó kristályok alakításakor. Vizsgáljuk most meg, hogy hogyan keletkeznek az ott leírt diszlokációszerkezetek.



9. ábra. Csúszási diszlokációhurok keletkezése Orowan mechanizmussal (a) és prizmatikus diszlokációhurok kialakulása a Hirsch-féle kettős keresztcsúszás mechanizmussal éldiszlokáció (b), illetve csavar-diszlokáció (c) esetén

Az alakváltozás kezdetén az első mozgó diszlokációk kihajlanak a részecskék között és elegendően nagy kihajlás esetén [1] egy diszlokációhurkot hátrahagyva a részecske körül továbbhaladnak anélkül, hogy az elsődleges csúszási rendszerből ki lépnének (Orowan mechanizmus, 9a. ábra). Az Orowan mechanizmusban tehát mindegyik elhaladó diszlokáció egy elsődleges Burgers-vektorú nyírási hurkot hagy a részecskék körül, így kialakulhatnak a 7c. és a 8b. ábrákon látható nyírási hurok-rendszerek a (11) egyenletnek megfelelő diszlokációsűrűséggel.

A prizmatikus huroksorozatok kialakulásának mechanizmusát a 9b. és c. ábrák szemléltetik (Hirsch mechanizmus) [13, 17]. A Hirsch mechanizmusnál egy éldiszlokáció a részecske körül kihajlik (9b. ábra) és így a részecske melletti csavardiszlokáció jellegű szakaszok keresztcsúszással elhagyhatják az elsődleges csúszási rendszert. További keresztcsúszás eredményeként két prizmatikus hurok keletkezik a részecske előtt és mögött, melyek közül az egyiket a továbbhaladó diszlokáció, mint prizmatikus lépcsőt magával viheti. A részecskét ily módon elhagyó prizmatikus hurok azonban benne marad a kristályban és így a diszlokációsűrűség számításánál figyelembe kell venni ezeket is. Ez a mechanizmus működhet ugyanakkora kritikus csúsztató feszültségnél, mint az Orowan mechanizmus [14].



10. ábra. Prizmatikus huroksorozatok Al_2O_3 részecskék körül réz kristályban [13]

A Hirsch mechanizmus másik változatában (9c. ábra) a részecskén fennakadó csavardiszlokáció egy szakaszának többszörös keresztcsúszásával alakulnak ki prizmatikus hurkok. Réz kristályban keletkezett prizmatikus huroksorozatokot láthatunk Al_2O_3 részecskék mellett a 10. ábrán [13]. A Hirsch mechanizmus akkor működik, ha a keresztcsúszás megindításához szükséges feszültség nem nagyobb, mint az Orowan hurok létrehozásához szükséges feszültség. A Hirsch mechanizmus beindulásához szükséges feszültség azonban gyakran nagyobb, mint az Orowan feszültség. Ilyenkor egy vagy több Orowan hurok keletkezik, mielőtt a keresztcsúszáshoz szükséges loká-

lis feszültség kialakulna. Ezt követően a belső Orowan hurok keresztcsúszásánál alakulnak ki a prizmatikus hurkok, de a részecske körül továbbra is megmaradnak a nyírási hurkok [13, 18]. A 11. ábrán Cu—30% Zn kristályban láthatunk nyírási és prizmatikus hurkokat Al_2O_3 részecskék körül.



11. ábra. Nyírási és prizmatikus hurkok Cu—30% Zn kristályban Al_2O_3 részecskék körül [13]

2.5. Merev részecskéket tartalmazó kristályok alakítási keményedése

A kristályban a teljes diszlokációsűrűség a geometriai és a statisztikus diszlokációk sűrűségének összege:

$$\rho^t = \rho^G + \rho^S. \quad (15)$$

Egyenlőtengelyű részecskék esetén az egy részecske körül kialakuló prizmatikus hurkok számát, $n_p - t$ a 2.2. fejezetben meghatároztuk. A ρ^G geometriai diszlokációsűrűség meghatározásához tegyük fel, hogy a kristályban térfogategységenként N darab gömb alakú részecske van, átlagos sugaruk r . Ekkor a részecskék számát kifejezhetjük a térfogati hányad (f) és az átlagos sugár segítségével:

$$N = \frac{3f}{4r^3\pi} \quad (16)$$

és így a térfogategységben levő prizmatikus hurkok száma

$$N_p = n_p N. \quad (17)$$

A (13) és (17) egyenletek segítségével

$$N_p = \frac{3\gamma f}{r^2\pi b}. \quad (18)$$

A hurkok átlagos átmérője $\sqrt{2}r$, így a geometriai diszlokációsűrűség ebben az esetben közelítőleg a következőképpen írható:

$$\varrho^G = \frac{f}{r} \frac{4\gamma}{b}. \quad (19)$$

Az eddigiekhez hasonló módon meghatározható a geometriai diszlokációk eloszlása és sűrűsége kétdimenziós (lemez alakú) és egydimenziós (tű vagy pálcika alakú) részecskék esetén is [5]. Lemez alakú részecskékre például

$$\varrho^G = \frac{1}{l} \frac{4\gamma}{b} \quad (20)$$

adódik, ahol l a részecskék átlagos távolsága. A (19) egyenletben szereplő r/f hányados, illetve a (20) egyenletben szereplő l paramétert λ^G -vel jelölve a geometriai diszlokációk sűrűségére a

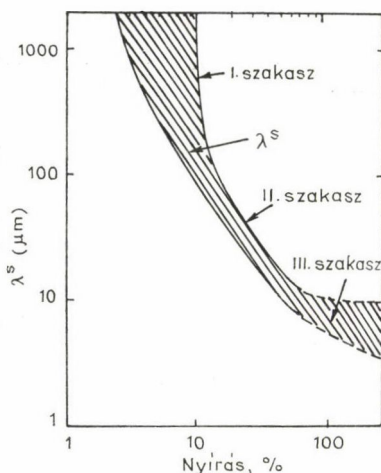
$$\varrho^G = \frac{1}{\lambda^G} \frac{4\gamma}{b} \quad (21)$$

összefüggést írhatjuk fel. A λ^G paraméter analóg a statisztikusan tárolt diszlokációk λ^S szabad úthosszával, amellyel a statisztikus diszlokációsűrűsége a (21) egyenlettel analóg differenciálegyenlet írható fel [5, 19]:

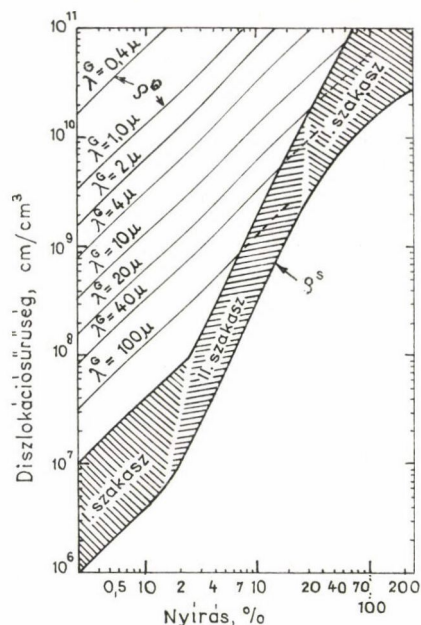
$$\delta\varrho^S = \frac{1}{\lambda^S} \frac{4\delta\gamma}{b}. \quad (22)$$

A λ^S és a λ^G paraméterek között azonban van egy lényeges különbség. λ^S a deformáció nagyságától függően változik és a csúszási vonalak hosszúságával mérhető, ezzel szemben λ^G csak a mikroszerkezet (részecskeméret, térfogati hányad) függvénye, a deformáció során nem változik és nem mérhető. A tiszta réz egykristályokra vonatkozó kísérleti eredmények alapján számított λ^S értékek a deformáció függvényében a 12. ábrán látható vonalkázott sávba esnek [5]. A részecskék hatása az alakítási tulajdonságokra azokban az ötvözetekben lesz erős, ahol λ^G lényegesen kisebb, mint λ^S . Az ábra alapján ez a $\lambda^G \lesssim 5 \mu\text{m}$ tartományban valósul meg.

Összehasonlíthatjuk a kétféle diszlokációsűrűség változását is. A 13. ábrán [5] réz egykristályokra vonatkozó ϱ^S adatokat láthatunk, valamint különböző λ^G értékeknek megfelelő lineáris $\varrho^G(\gamma)$ függvényeket. Látható, hogy a kis deformációknál domináló geometriai diszlokációsűrűséget csak később éri el a statisztikus diszlokációk sűrűsége, amely az alakítási keményedés második szakaszában közelítőleg γ^2 -tel arányosan nő. Ekkor azt várjuk, hogy az anyag visszatér a tiszta fémekre jellemző viselkedéshez. A $\lambda^G \lesssim 5 \mu\text{m}$ tartományban a geometriailag szükséges diszlokációk sűrűsége végig nagyobb, mint a statisztikus diszlokációsűrűség. Ez a tartomány a gyakorlatban is elérhető, pl. $\lambda^G = 5 \mu\text{m}$ érték adódik 100 nm átmérőjű, 1% térfogati hányadban jelenlevő részecskék esetén. Megjegyezzük azonban, hogy megfontolásainkban nem vettünk figyelembe diffúzióval végbemenő anyagtranszport folyamatokat, amelyek a ϱ^G értékét jelentősen csökkenthetik, különösen magasabb hőmérsékleteken [2, 5, 13, 16, 20–24]. Kisméretű részecskék esetén a diffúziós megújulási folyamatok már alacsony hőmérsékleteken ($T \sim 0,2 T_m$) is jelentősen csökkenthetik a diszlokációhurkok számát [16, 22].

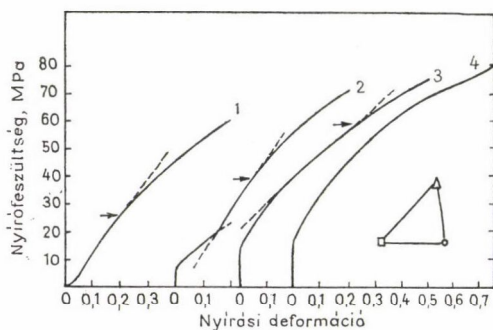


12. ábra. Kísérleti eredmények alapján meghatározott λ^S értékek a deformáció függvényében réz egykristályokban [5]



13. ábra. Statisztikus és különböző λ^G értékeknek megfelelő geometriai diszlokációsűrűség réz egykristályokban [5]

A 14. ábrán tiszta réz egykristály és azonosan orientált 1/3, 2/3 és 1 % gömb alakú, 90 nm átmérőjű SiO_2 részecskét tartalmazó kristály feszültség-deformáció görbéit láthatjuk [25]. Az 1/3 % SiO_2 -t tartalmazó ötvözetben (2. görbe) $\lambda^G \approx 15 \mu\text{m}$, az 1 %-ot tartalmazóban (4. görbe) $\lambda^G \approx 5 \mu\text{m}$. Látható, hogy a 2. görbe kb. 15 % deformációtól kezdve visszatér a tiszta egykristály jellegű alakítási keményedéshez, míg a 4. görbénél az alakítási keményedés I. és II. szakasza hiányzik, a teljes feszültség-deformáció görbét döntően a geometriai diszlokációk határozzák meg.



14. ábra. Tiszta réz egykristály és azonosan orientált 1/3%, 2/3% és 1% gömb alakú, 90 nm átmérőjű SiO_2 részecskét tartalmazó kristály feszültség-deformáció görbéi [24]

Az alakítási keményedés szempontjából a geometriai diszlokációk hosszú- és rövidtávú feszültségtere is lényeges. A gömb alakú részecskéket körülvevő Orowan hurkok hosszútávú feszültségterének következtében a mátrixban a diszlokációk mozgását akadályozó τ_L feszültség lép fel [7], amely nem függ a részecskék méretétől, csak a nyírási deformációtól és a részecskék térfo-

gati hányadától [8]:

$$\tau_L = 6G\gamma f^{3/2}. \quad (23)$$

A 2.3. pontban már említettük, hogy az alakítás során a lokális feszültség a részecskék körül gyorsan nő és kb. 1 % nyírási deformáció után a nyírási hurok rendszer instabillá válik és átrendeződik, ettől kezdve a belső feszültség az alakítással alig változik. A kezdeti deformációk tartományában azonban kísérletek is igazolják a hosszútávú belső feszültségek lényeges szerepét és a (23) összefüggést [8].

Nagyobb deformációknál az alakítási keményedés sebessége a térfogati hányadon kívül a részecskemérettől is függ, ez azt jelzi, hogy a rövidtávú feszültségek szerepe jelentőssé válik. A nyírási hurkok átalakulásánál prizmatikus hurkok alakulnak ki. Egy mozgó diszlokáció és a részecske körüli geometriai diszlokációk közötti kölcsönhatás függ a geometriai diszlokációk számától, típusától és eloszlásától. Ahhoz azonban, hogy egy közelítő becslést adjunk a rövidtávú belső feszültségeknek az alakítási keményedésre való hatásáról, elegendő a geometriai diszlokációszerkezetet egyetlen paraméterrel, a diszlokációsűrűséggel jellemezni. A csúszó és az akadályozó diszlokációk közötti kölcsönhatásból a feszültség és a diszlokációsűrűség között a

$$\tau = \tau_0 + 2CGb\sqrt{\rho} \quad (24)$$

összefüggés adódik [10, 19, 26], ahol a C állandó értéke 0,15 és 0,5 között változhat. A (21) egyenletet felhasználva, felírhatjuk a feszültség-deformáció függvényt:

$$\tau = \tau_0 + 2CG\sqrt{\frac{b\gamma}{\lambda^G}}. \quad (25)$$

Mivel λ^G független a deformációtól, ez az összefüggés egy parabolikus feszültség-deformáció függvényt ad. A (19) és (20) egyenletek segítségével 3 dimenziós (egyenlőtengelyű) részecskékre a

$$\tau = \tau_0 + 2CG\sqrt{\frac{b\gamma f}{r}}, \quad (26)$$

2 dimenziós (lemez alakú) részecskékre a

$$\tau = \tau_0 + 2CG\sqrt{\frac{b\gamma}{l}} \quad (27)$$

összefüggések adódnak. Ezek az összefüggések akkor jellemzik az alakítási keményedést, ha a geometriai diszlokációsűrűség dominál a statisztikushoz képest ($\rho^G > \rho^S$, illetve $\lambda^G < \lambda^S$) és ha nincs lényeges szerepe a diffúziós és egyéb megújulási folyamatoknak, valamint ha a deformáció elég nagy ahhoz, hogy a hosszútávú feszültségek már ne változzanak a deformációval. Ezen feltételek teljesülése esetén a kísérleti tapasztalatok is igazolják a (25) és (27) összefüggések helyességét [5, 16].

Relaxációs folyamatok lényegesen csökkenthetik a geometriai diszlokációsűrűséget és így módosíthatják a feszültség-deformáció függvényt. A relaxációs folyamatok közül a már említett diffúziós anyagtranszport és a részecskékben is meginduló alakváltozás a legfontosabb. Ezekkel az effektusokkal itt most nem foglalkozunk, megemlítjük azonban, hogy ha a diffúziós folyamatokat kizárjuk, akkor relaxációs folyamatok fellépése esetén is az Ashby-féle (26) és (27) összefüggéssel lényegében megegyező feszültség-deformáció függvények adódnak [16, 27].

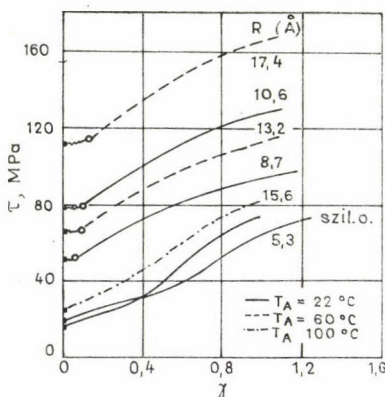
3. Alakváltozás átvágható részecskéket tartalmazó ötvözetekben

Koherens, átvágható részecskéket tartalmazó kristály alakításakor a diszlokációk elegendően nagy csúsztató feszültség hatására áthaladnak a részecskén és elnyírnak. Mivel ilyenkor a mátrix és a részecske is deformálódnak, az alakváltozás lényegében homogén marad. Ennek következtében a feszültség-deformáció görbék hasonlóak maradnak az egyfázisú anyag görbéjéhez. Erre láthatunk példát Al—2 at % Zn—1 at % Mg ötvözet egykristályok esetében a 15. ábrán [28]. A szilárdoldat és a kisméretű koherens GP zónákat tartalmazó ötvözet esetén jól megfigyelhető az alakítási keményedés I. szakasza, amely kb. 40% deformációnál megy át a II. szakaszba. Polikristályos anyagoknál csaknem a teljes alakváltozási folyamat parabolikus jellegű, amint azt egy, az előzővel azonos összetételű, polikristályos Al—Zn—Mg ötvözetben végzett vizsgálatok eredményei bizonyítják (16. ábra) [29]. Az egykristályok esetén a deformáció sokszor instabil folyással indul. Hasonló jelenséget észleltek koherens kiválásokot tartalmazó réz egykristályokon is. [3].

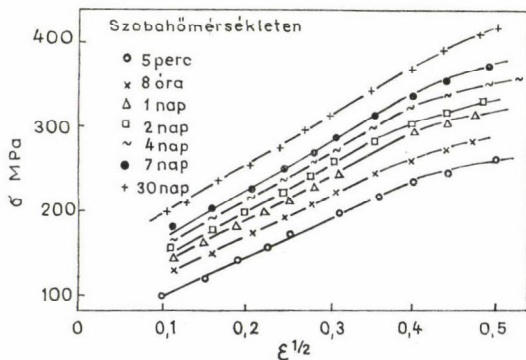
Az ötvözetek esetében a folyásfeszültség lényegesen magasabb, következésképpen a diszlokáció sokszorozódás sokkal erősebb, mint a tiszta fémeknél. Az alakítási keményedés nagyobb sebessége és mértéke a megnövekedett diszlokációsűrűség következménye. Az egy-két nagyságrenddel nagyobb diszlokációsűrűségek ellenére az ötvözet egykristályokban csaknem a teljes alakváltozási folyamat I. szakasz jellegű. A diszlokációszerkezet nagyon hasonló a tiszta fémekéhez [3, 28], azaz csaknem kizárólag elsődleges csúszási rendszerbeli diszlokációk figyelhetők meg. A folyásfeszültség, amint az a 15. ábrán látható, a tiszta fémekre jellemző lineáris függvénytől lefelé görbül. Hartmann feltételezte, hogy ez az eltérés a kiválások átvágásának következménye, és a következő feszültség-deformáció összefüggést írta fel [30, 31]:

$$\tau = \tau_0 + \vartheta_m \gamma - \Delta\tau(\gamma, r, f), \quad (28)$$

ahol ϑ_m a $\tau - \gamma$ görbe maximális meredeksége (a 15. ábrán a körrel jelölt pontoknál).



15. ábra. Al—2 at % Zn—1 at % Mg egykristályok alakítási keményedési görbéi szilárdoldat állapotban, valamint különböző hőmérsékleteken, különböző méretű GP zónákra öregített állapotban [28]



16. ábra. Polikristályos Al—2 at % Zn—1,1 at % Mg ötvözet folyásfeszültsége a nyújtási deformáció négyzetgyökének függvényében szilárdoldat állapotban és különböző időtartamú szobahőmérsékleti öregítések után [29]

A (28) összefüggés utolsó tagja írja le a részecskék átvágása következtében fellépő lágyulást, $\vartheta_m \gamma$ pedig a diszlokációsűrűség növekedése következtében bekövetkező szilárdságnövekedést. A kísérleti eredmények szerint $\vartheta_m \gamma$ arányos a diszlokációsűrűséggel és az arányossági tényező ugyanannyi, mint a tiszta fémekben. A ϑ_m paraméter értéke a térfogati hányad növekedésével kis mértékben nő, eddig azonban még nem született olyan elmélet, amely értelmezné ezen paraméternek a részecskemérettől és a térfogati hányadtól való függését. A $\Delta \tau$ függvényre vonatkozóan ugyancsak hiányzik a megfelelő magyarázat.

Polikristályos anyagok esetén a ϑ_m paraméterhez hasonlóan a $\sigma - \varepsilon^{1/2}$ egyenesek meredeksége mutat enyhe növekedést a kiválások térfogati hányadának növekedtével (16. ábra) [29].

Egykristályok esetén a diszlokációk eloszlása homogén [3, 28], míg polikristályos mintákban gyakran észleltek inhomogén, sávos diszlokációszerkezetet [27, 32, 33].

4. Összefoglalás

Dolgozatunkban áttekintést adtunk az idegen fázisú részecskékkel keményített anyagok alakváltozási folyamatainak mechanizmusáról. A részecskék alakváltozással szembeni ellenállása különböző lehet, a két véglet a deformálhatatlan, merev részecskék, illetve a teljesen koherens, átvágható részecskék esete.

A merev részecskéket tartalmazó ötvözet alakváltozása inhomogén. Az ilyen rendszerek viselkedését *Ashby* nyomán az alakítás kompatibilitásának megőrzéséhez szükséges, úgynevezett geometriailag szükséges diszlokációk és a statisztikus diszlokációk sűrűségének és kölcsönhatásának leírásával tárgyaltuk. A geometriai diszlokációk elrendeződése és sűrűsége viszonylag egyszerű és szemléletes megfontolások alapján meghatározható, még akkor is, ha maga az alakváltozás bonyolult. Az elméleti eredmények alkalmasak a kísérletileg mért feszültség-deformáció görbék kvantitatív értelmezésére is.

Az átvágható kiválások esetében a deformáció homogén, ilyenkor az alakítási keményedés a tiszta, illetve egyfázisú anyagokéhoz hasonló. Az alakítási folyamat részleteinek leírására ebben az esetben még nem áll rendelkezésre megfelelő elméleti modell. Ugyancsak további vizsgálatokra van szükség az egykristály és polikristály minták viselkedésében mutatkozó eltérések tisztázásához.

Reális anyagokban a részecskék alakítással szembeni ellenállása változhat. Az alakítási folyamat kezdetén merevként viselkedő részecskében a deformáció előrehaladtával nagy mértékben növekvő lokális feszültségek hatására a részecske átvághatóvá válhat. Ugyancsak lényegesen változtathatja a deformálhatatlan részecskékkel szilárdított rendszer alakítási tulajdonságait, ha a részecske környezetében diffúzió révén megújulási folyamatok mennek végbe. Ez a részecske-mátrix határfelületen, illetve a diszlokációk mentén lehetséges gyors diffúzió miatt már alacsony hőmérsékleteken ($0,2 T_m$ alatt) megtörténhet és különösen lényeges a magashőmérsékleti mechanikai tulajdonságok szempontjából.

IRODALOM

1. Lendvai J., Magy. Fiz. Folyóirat, 29, 328, 1981.
2. A. Kelly and R. B. Nicholson, Progr. Mat. Sci. 10, 151, 1963.
3. K. G. Hartmann, Z. Metallkde 62, 736, 1971.
4. M. F. Ashby, Phil. Mag. 21, 399, 1970.
5. M. F. Ashby, Strengthening Methods in Crystals, eds. A. Kelly and R. B. Nicholson, Elsevier, Amsterdam, 1971. p. 137..
6. Tasnádi P. és Rajkovits Zs., Magy. Fiz. Folyóirat, 29, 235, 1981.
7. J. C. Fischer, E. W. Hart and R. H. Pry, Acta Met. 1, 336, 1953.
8. M. F. Ashby, Proc. Second Bolton Landing Conf. on Oxide Dispersion Strengthening, Gordon and Breach, New York, 1968. p. 143.
9. R. J. Price and A. Kelly, Acta Met. 10, 980, 1962.
10. Kovács I. és Zsoldos L., Diszlokációk és képlékeny alakváltozás, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1965.
11. G. C. Weatherly, Metal Sci. J. 2, 237, 1968.
12. M. F. Ashby and L. A. Johnson, Phil. Mag. 20, 1009, 1969.
13. P. B. Hirsch and F. J. Humphries, Physics of Strength and Plasticity, ed. A. Argon, M. I. T. Press, Cambridge, 1969.
14. F. J. Humphreys and J. W. Martin, Phil. Mag. 16, 927, 1967.
15. F. J. Humphreys and A. T. Stewart, Surf. Sci. 31, 389, 1972.
16. L. M. Brown, Proc. Fifth. Int. Conf. Strength Metals and Alloys, eds. P. Haasen, V. Gerold and G. Kostorz, Pergamon, Toronto, 1980. Vol. 3. p. 1551.
17. P. B. Hirsch, J. Inst. Metals, 86, 13, 1957/58.
18. H. Gleiter, Acta Met. 16, 1213, 1968.
19. Vörös Gy. és Kovács I., Magyar Fiz. Folyóirat, 29, 201, 1981.
20. R. L. Jones, Acta Met. 17, 229, 1969.
21. W. M. Stobbs, Phil. Mag. 30, 1073, 1973.
22. R. C. Koeller and R. Raj, Acta Met. 26, 1551, 1978.
23. T. Mori and K. Narita, Acta Met. 23, 85, 1975.
24. D. Gould, P. B. Hirsch and F. J. Humphreys, Phil. Mag. 30, 1353, 1974.
25. R. Ebeling and M. F. Ashby, Phil. Mag. 13, 805, 1966.
26. F. R. N. Nabarro, Z. S. Basinski and D. B. Holt, Adv. in Physics, 13, 193, 1964.
27. V. Gerold, Dislocations in Solids, ed. F. R. N. Nabarro, North-Holland, Amsterdam, 1979. Vol. 4. p. 219.
28. K. H. Dönkeloh, G. Kralik and V. Gerold, Z. Metallkde, 65, 773, 1974.
29. I. Kovács, J. Lendvai, T. Ungár, T. Turmezey and G. Groma, Acta Met. 25, 673, 1977.
30. K. Hartmann, Z. Metallkde. 62, 877, 1971.
31. K. Hartmann and V. Gerold, Mater. Sci. Eng. 10, 63, 1972.
32. Lendvai J., Magy. Fiz. Folyóirat, 26, 533, 1978.
33. K. Banizs and L. Vitális, Z. Metallkde, 68, 554, 1977.

4. POLIKRISTÁLYOK RUGALMAS ÉS KÉPLÉKENY TULAJDONSÁGAI

KOVÁCS ISTVÁN

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOM

1. Bevezetés	409
2. Polikristályok rugalmas tulajdonságai	409
2.1. Egykristályok rugalmas állandói	409
2.2. Izotrop anyag rugalmas állandói	412
2.3. Összefüggés a polikristály és egykristály rugalmas állandói között	414
2.4. Átlagolási módszerek makroszkopikusan izotrop polikristály rugalmas állandóinak meghatározására	415
2.4.1. Voigt és Reuss átlagolás	415
2.4.2. A nyírási modulusz meghatározása a Debye hőmérsékletből	418
3. Polikristályok képlékeny alakváltozása	419
3.1. Polikristály képlékeny alakváltozásának feltételei	420
3.2. Összefüggés egykristály folyáshatára és a kritikus csúsztató feszültség között	421
3.3. Összefüggés polikristály folyáshatára és a kritikus csúsztató feszültség között	423
3.4. A folyáshatár függése a szemcseméretől	425
3.5. Polikristály alakítási keményedése	427
4. Összefoglalás	427
5. Irodalom	427

1. Bevezetés

A gyakorlatban felhasznált anyagok a legtöbb esetben polikristályos szerkezetűek. A dolgozatban az ilyen testek mechanikai sajátosságait tekintjük át. Ha külső erő hat egy polikristályos testre, akkor a különböző szemcsékhez tartozó kristálytani tengelyek orientációja a külső erőhöz képest jelentősen változik. Emiatt a polikristályok rugalmas és képlékeny tulajdonságai bonyolult kapcsolatban vannak a megfelelő egykristály tulajdonságokkal. Ez a kapcsolat jelentősen függ a szemcse orientáció eloszlásától is. Dolgozatunkban elsősorban a véletlenszerű szemcseorientációjú polikristályokkal foglalkozunk.

2. Polikristályok rugalmas tulajdonságai

2.1. Egykristályok rugalmas állandói

A klasszikus rugalmasságtanban egykristály kis rugalmas alakváltozása során a feszültségek és deformációk között lineáris összefüggést tételezünk fel (általánosított Hooke törvény):

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \epsilon_{kl}; \quad (i, j, k, l = 1, 2, 3), \quad (1)$$

ahol σ_{ij} a feszültségtenzor, ε_{kl} a deformációs tenzor és C_{ijkl} a rugalmas állandó tenzor, amely 81 komponenst tartalmaz (a kétszer előforduló indexek összegezését jelentenek az 1, 2, 3 indexpárookra). A 81 komponens a legáltalánosabb esetben 21 független elemet jelent az alábbi szimmetria relációk miatt [1]:

$$C_{ijkl} = C_{jikl}; \quad C_{ijkl} = C_{ijlk}; \quad C_{ijkl} = C_{klij}. \quad (2)$$

A 21 független komponensből egy 6×6 -os szimmetrikus, c_{ik} mátrix képezhető. Ezért a szimmetrikus feszültség, illetve deformáció tenzor helyett vezessük be az alábbi, a megfelelő tenzorokkal egyenértékű hat dimenziós vektorokat:

$$(\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \sigma_{23}, \sigma_{13}, \sigma_{12}) = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5, \sigma_6), \quad (3)$$

$$(\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{33}, \varepsilon_{23}, \varepsilon_{13}, \varepsilon_{12}) = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4, \varepsilon_5, \varepsilon_6). \quad (4)$$

Ezekkel a Hooke törvény az alábbi alakban írható fel:

$$\sigma_i = \sum_{k=1}^6 c_{ik} \varepsilon_k. \quad (5)$$

A gyakorlatban az utóbbi rugalmas állandókat használjuk, amelyeknek a C_{ijkl} tenzor elemeivel való kapcsolatát az (1) és (5) egyenletek összehasonlításából kaphatjuk meg.

Rombos szimmetriájú ($a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$) kristályok [2] esetén explicit összefüggés adható meg a két rugalmas állandó tenzor között a krisztallográfiai tengelyekkel összeeső koordinátarendszer esetén az alábbi alakban [3]:

$$C_{ijkl} = \sum_{n=1}^3 \{ \lambda_n \delta_{in} \delta_{jn} \delta_{kn} \delta_{ln} + \mu_n (\delta_{in} \delta_{jn} \delta_{kl} + \delta_{ij} \delta_{kn} \delta_{ln}) + \\ + \nu_n (\delta_{in} \delta_{jk} \delta_{ln} + \delta_{jn} \delta_{ik} \delta_{ln} + \delta_{in} \delta_{jl} \delta_{kn} + \delta_{jn} \delta_{il} \delta_{kn}) \}, \quad (6)$$

ahol δ_{ik} -k a Kronecker delták és

$$\left. \begin{aligned} \lambda_1 &= c_{11} + c_{23} + 2c_{44} - (c_{12} + c_{13} + 2c_{55} + 2c_{66}), \\ \lambda_2 &= c_{22} + c_{13} + 2c_{55} - (c_{12} + c_{23} + 2c_{44} + 2c_{66}), \\ \lambda_3 &= c_{33} + c_{12} + 2c_{66} - (c_{13} + c_{23} + 2c_{44} + 2c_{55}), \\ 2\mu_1 &= c_{12} + c_{13} - c_{23}, & 2\nu_1 &= c_{55} + c_{66} - c_{44}, \\ 2\mu_2 &= c_{12} + c_{23} - c_{13}, & 2\nu_2 &= c_{44} + c_{66} - c_{55}, \\ 2\mu_3 &= c_{13} + c_{23} - c_{12}, & 2\nu_3 &= c_{44} + c_{55} - c_{66}. \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

E kilenc független rugalmas állandót tartalmazó kifejezések jelentősen egyszerűsödnek nagyobb szimmetriájú kristályok esetén. Pl. hexagonális kristályra (öt független állandó):

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \lambda_2 = 0, & \lambda_3 &= c_{11} + c_{33} - 2(c_{13} + 2c_{44}), \\ 2\mu_1 &= 2\mu_2 = c_{12}, & 2\mu_3 &= 2c_{13} - c_{12}, \\ 4\nu_1 &= 4\nu_2 = c_{11} - c_{12}, & 4\nu_3 &= 4c_{44} + c_{12} - c_{11}, \end{aligned} \quad (8)$$

vagy köbös kristályra (három független állandó):

$$\begin{aligned}\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 &= c_{11} - c_{12} - 2c_{44}, \\ \mu_1 = \mu_2 = \mu_3 &= \frac{1}{2} c_{12}, \quad \nu_1 = \nu_2 = \nu_3 = \frac{1}{2} c_{44}.\end{aligned}\quad (9)$$

Végül izotrop anyag esetén $2c_{44} = c_{11} - c_{12}$, amivel a független rugalmas állandók száma kettőre csökken és így:

$$\begin{aligned}\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 &= 0, \quad \mu_1 = \mu_2 = \mu_3 = \frac{1}{2} c_{12}, \\ \nu_1 = \nu_2 = \nu_3 &= \frac{1}{4} (c_{11} - c_{12}).\end{aligned}\quad (10)$$

Bevezetve a $c_{12} = \lambda$, $(c_{11} - c_{12})/2 = \mu$ jelöléssel a Lamé-féle rugalmas állandókat, (6) és (10) felhasználásával az izotrop test négyindexes rugalmas állandó tenzora:

$$C_{ijkl}^* = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}). \quad (11)$$

A köbös kristályok négyindexes rugalmas állandó tenzora is viszonylag egyszerű alakban megadható:

$$C_{ijkl}^K = c_{12} \delta_{ij} \delta_{kl} + c_{44} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) + (c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) \delta_{ijkl}, \quad (12)$$

ahol $\delta_{ijkl} = 1$, ha $i=j=k=l$ és minden más esetben nulla. A kétindexes rugalmas állandó mátrix erre az esetre a következő:

$$c_{ik}^K = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Az 1. táblázatban megadjuk néhány hexagonális és köbös szerkezetű fém rugalmas állandóit.

A C_{ijkl} rugalmas állandó tenzor helyett használatos az S_{ijkl} reciprok rugalmas állandó tenzor is. Ennek segítségével a deformációk adhatók meg a Hooke törvény alapján adott feszültségek függvényeként az alábbi alakban:

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijkl} \sigma_{kl}. \quad (14)$$

Az S_{ijkl} tenzor ugyanolyan tulajdonságú a különböző kristályok esetén, mint a C_{ijkl} . Ezért az előző gondolatmenet megismételhető a reciprok rugalmassági tenzorral is. Mivel az (1) és (14) egyenletek egymással egyenértékűek, ezért a két tenzor közötti kapcsolat az alábbi összefüggéssel adható meg:

$$C_{ijkl} S_{ijmn} = \frac{1}{2} (\delta_{km} \delta_{ln} + \delta_{kn} \delta_{lm}), \quad (15)$$

ahol a jobb oldali kifejezés egy négyindexes egységtenzor.

1. TÁBLÁZAT

Néhány fém szobahőmérsékleti adiabatikus rugalmas állandóinak értékei (10^{10} N/m²)

Anyag	c_{11}	c_{12}	c_{44}	c_{33}	c_{13}
Hexagonális	Cd	11,5	4,0	2,0	5,1
	Co	30,7	16,5	7,5	35,8
	Mg	5,9	2,5	1,7	6,1
	Zn	16,1	3,4	3,8	6,1
Köbös	Ag	12,4	9,3	4,6	—
	Al	10,7	6,1	2,8	—
	Au	18,6	15,7	4,2	—
	Cu	16,8	12,1	7,5	—
	Ni	25,1	15,0	12,4	—
	Fe	23,3	13,5	11,8	—
	Mo	44,1	17,2	12,2	—
	W	52,3	20,5	16,1	—

2.2. Izotrop anyag rugalmas állandói

A kristályos szilárdtestek egykristályai mindig anizotrop rugalmas tulajdonságúak. Ezért izotrop tulajdonságú csak egy olyan polikristályos test lehet, amely nagy számú, a makroszkopikus méreténél sokkal kisebb átlagos méretű, teljesen véletlenszerű orientációjú kristályszemcséből áll. Mivel a gyakorlati életben felhasznált fémek sok esetben ilyenek, ezért célszerű a (makroszkopikusan) izotrop testek rugalmas tulajdonságaival részletesebben is foglalkozni.

Az izotrop testek rugalmas tulajdonságai két független rugalmas állandóval jellemezhetők. Mivel az előző pontban bevezetett Lamé állandók közül λ -nak nincs közvetlen fizikai jelentése, ezért a gyakorlatban általában más rugalmas állandó párokat használnak. Ezek lehetnek pl. a μ nyírási modulusz és a K térfogati rugalmassági modulusz, a μ és a ν Poisson-szám, a ν és az E Young modulusz, vagy a μ és az E . Az ezek közötti összefüggéseket a 2. táblázatban adtuk meg.

A képlékeny alakváltozás megindításában a hidrosztatikai feszültségek nem vesznek részt, ezért az összetett feszültségállapotot jellemző feszültség tenzort sokszor célszerű egy, csak a hidrosztatikai feszültségeket és egy, csak a tiszta nyírási alakváltozásokkal kapcsolatos feszültségeket jellemző tag összegeként megadni:

$$\sigma_{ij} = \sigma'_{ij} + \frac{1}{3} \sigma_{nn} \delta_{ij}, \quad (16)$$

ahol

$$\sigma_{nn} = c_{nnkl} e_{kl} \quad \text{és} \quad \sigma'_{nn} = 0. \quad (17)$$

2. TÁBLÁZAT

Összefüggések az izotrop testek rugalmas állandói között

	Rugalmas állandó párok				
	λ, μ	K, μ	μ, ν	E, ν	E, μ
λ	λ	$K - \frac{2}{3}\mu$	$\frac{2\mu\nu}{1-2\nu}$	$\frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)}$	$\frac{\mu(E-2\mu)}{3\mu-E}$
μ	μ	μ	μ	$\frac{E}{2(1+\nu)}$	μ
K	$\lambda + \frac{2}{3}\mu$	K	$\frac{2\mu(1+\nu)}{3(1-2\nu)}$	$\frac{E}{3(1-2\nu)}$	$\frac{E\mu}{3(3\mu-E)}$
E	$\frac{(3\lambda+2\mu)\mu}{\lambda+\mu}$	$\frac{9K\mu}{3K+\mu}$	$2(1+\nu)\mu$	E	E
ν	$\frac{\lambda}{2(\lambda+\mu)}$	$\frac{3K-2\mu}{6K+2\mu}$	ν	ν	$\frac{1}{2} \frac{E}{\mu} - 1$

 σ'_{ij} -t deviátor feszültségnek nevezzük. Izotrop test esetén

$$\sigma_{nn} = 3K\varepsilon_{nn} \quad \text{és} \quad \sigma'_{ij} = 2\mu \left(\varepsilon'_{ij} - \frac{1}{3} \varepsilon_{nn} \delta_{ij} \right). \quad (18)$$

A rugalmas állandó tenzor is felbontható két olyan tagra, amelyek közül az egyik adott deformációk esetén a hidrosztatikai, a másik a deviátor feszültségeket határozza meg. Ehhez bontsuk fel a (15)-ben definiált egységtenzort az alábbi formában:

$$E_{klmn} = V_{klmn} + D_{klmn},$$

ahol

$$V_{klmn} = \frac{1}{3} \delta_{kl} \delta_{mn}, \quad (19)$$

$$D_{klmn} = \frac{1}{2} \left(\delta_{km} \delta_{ln} + \delta_{kn} \delta_{lm} - \frac{2}{3} \delta_{kl} \delta_{mn} \right). \quad (20)$$

Ezekkel a (16)-ban szereplő feszültség járulékok azonnal megadhatók az alábbi formában:

$$\sigma_{kl}^h = V_{klmn} C_{nmij} \varepsilon_{ij} = \frac{1}{3} C_{nmij} \varepsilon_{ij} \delta_{kl}, \quad (21)$$

$$\sigma'_{kl} = D_{klmn} C_{nmij} \varepsilon_{ij} = C_{klij} \varepsilon_{ij} - \frac{1}{3} C_{nmij} \varepsilon_{ij} \delta_{kl}. \quad (22)$$

Izotrop test esetén a (11) alatti rugalmas állandó tenzor közvetlenül kifejezhető a \tilde{V} és \tilde{D} tenzorokkal:

$$C_{ijkl}^* = 3KV_{ijkl} + 2\mu D_{ijkl}, \quad (23)$$

illetve a reciprok rugalmas állandó tenzor (15) alapján:

$$S_{ijkl}^* = \frac{1}{3K} V_{ijkl} + \frac{1}{2\mu} D_{ijkl}. \quad (24)$$

A (11) és (15) egyenletek felhasználásával egyszerűen beláthatók az alábbi összefüggések:

$$K = \frac{1}{9} C_{iikk}^*; \quad \mu = \frac{1}{10} \left(C_{ikik}^* - \frac{1}{3} C_{iikk}^* \right), \quad (25)$$

$$\frac{1}{K} = S_{iikk}^*; \quad \frac{1}{\mu} = \frac{2}{5} \left(S_{ikik}^* - \frac{1}{3} S_{iikk}^* \right). \quad (26)$$

2.3. Összefüggés a polikristály és egykristály rugalmas állandói között

Tekintsünk egy próbatestet, amely sok kicsiny kristályszemcséből áll. Egy adott szemcséhez tartozó krisztallográfiai tengelyek helyzetét a laboratóriumi (a próbatesthez rögzített) koordináta-rendszerben a $(\vartheta, \varphi, \psi)$ Euler szögekkel jellemezhetjük. Ha a szemcsék orientáció eloszlását (a texturát) az $f(\vartheta, \varphi, \psi)$ függvény adja meg, akkor a próbatest effektív rugalmas modulusait az alábbi átlagértékkel definiáljuk:

$$\langle C_{ijkl} \rangle = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} f(\vartheta, \varphi, \psi) C'_{ijkl}(\vartheta, \varphi, \psi) \sin \vartheta \, d\vartheta \, d\varphi \, d\psi. \quad (27)$$

Az átlagérték meghatározása texturás anyag esetén az $f(\vartheta, \varphi, \psi)$ függvény ismeretében lehetséges [4–6]. A következőkben csak azzal az esettel foglalkozunk, amikor a szemcsék orientáció eloszlása teljesen véletlenszerű, azaz $f(\vartheta, \varphi, \psi) = 1$. Az ilyen anyag makroszkopikusan izotrop. Az átlagértéket ekkor röviden a következőképpen jelöljük:

$$\langle C_{ijkl} \rangle = \frac{1}{V} \int_V C'_{ijkl} dV, \quad (28)$$

ahol C'_{ijkl} egy kiszemelt ΔV térfogatú szemcse rugalmassági modulusait jelenti a laboratóriumi koordináta-rendszerben és V a minta térfogata.

Vektorok és tenzorok forgatási transzformációi kétindexes, ortogonális α_{ij} mátrixokkal írhatók le, amelyek a forgatást jellemző iránykoszinuszokat tartalmazzák és teljesítik az alábbi összefüggést [7]:

$$\alpha_{ij} \alpha_{kj} = \delta_{ik}. \quad (29)$$

Egy négyindexes tenzor forgatási transzformációja a következő alakban adható meg:

$$C'_{ijkl} = \alpha_{ip} \alpha_{jq} \alpha_{kr} \alpha_{ls} C_{pqrs}. \quad (30)$$

Ezt felhasználva, egy kiszemelt szemcse rugalmas állandói rombos kristályszerkezet esetén laboratóriumi koordináta-rendszerben (6) helyett a következő alakúak lesznek:

$$C'_{ijkl} = \sum_{n=1}^3 \{ \lambda_n \alpha_{in} \alpha_{jn} \alpha_{kn} \alpha_{ln} + \mu_n (\alpha_{in} \alpha_{jn} \delta_{kl} + \delta_{ij} \alpha_{kn} \alpha_{ln}) + \\ + \nu_n (\alpha_{in} \delta_{jk} \alpha_{ln} + \alpha_{jn} \delta_{ik} \alpha_{ln} + \alpha_{in} \delta_{jl} \alpha_{kn} + \alpha_{jn} \delta_{il} \alpha_{kn}) \}. \quad (31)$$

2.4. Átlagolási módszerek makroszkopikusan izotrop polikristály rugalmas állandóinak meghatározására

A makroszkopikusan izotrop polikristály rugalmas állandóinak meghatározása a (28) alatti átlagérték kiszámítását teszi szükségessé a (30) kifejezés behelyettesítése után. Az átlagolást az α_{ik} mátrixokban szereplő iránykoszinuszok minden lehetséges értékére ki kell terjeszteni.

Jelenleg nem ismeretes olyan módszer, amellyel az átlagérték egzakt módon meghatározható lenne, bár az irodalomban nagy számú ilyen vizsgálat ismeretes [8–16]. A következőkben összefoglalunk néhány alapvető közelítő módszert, amelyek alapján az izotrop polikristályok rugalmas állandói megbecsülhetők.

Jellemezze a laboratóriumi koordináta-rendszerben a külső erőktől származó makroszkopikus feszültségállapotot σ_{ij}^* , a makroszkopikus deformációkat ε_{ij}^* . Az egyes szemcsékben a külső erők hatására kialakuló σ_{ij} feszültségek és a lokális ε_{ij} deformációk a makroszkopikustól jelentősen eltérhetnek. Nyilvánvaló azonban, hogy a kétféle feszültségek és deformációk között teljesülniük kell az alábbi összefüggéseknek:

$$\sigma_{ij}^* = \frac{1}{V} \int_V \sigma_{ij} dV, \quad (32)$$

$$\varepsilon_{ij}^* = \frac{1}{V} \int_V \varepsilon_{ij} dV. \quad (33)$$

A makroszkopikus feszültségeket és deformációkat a rugalmas állandók egzakt átlagértéke kapcsolja össze, azaz

$$\sigma_{ij}^* = \langle C_{ijkl} \rangle \varepsilon_{kl}^*, \quad (34)$$

$$\sigma_{ij} = C'_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \quad (35)$$

ahol C'_{ijkl} az adott szemcsére érvényes (30) alatti kifejezés. A teljesen véletlenszerű szemcse orientáció eloszlás miatt nyilvánvaló, hogy $\langle C_{ijkl} \rangle$ izotrop testet kell, hogy jellemezzen, vagyis a (11) jelöléssel

$$\langle C_{ijkl} \rangle = C_{ijkl}^*. \quad (36)$$

2.4.1. Voigt és Reuss átlagolás

A (32) integrál egzakt kiszámításához minden szemcsére meg kellene határozunk a feszültségeket és deformációkat úgy, hogy teljesüljenek a szemcsehatárok mentén az erőegyensúlyra és az anyag folytonosságára vonatkozó határfeltételek.

Ezen általában járhatatlan út helyett az első közelítő eljárást Voigt vezette be [17]. Tegyük fel, hogy valamennyi szemcsében a makroszkopikussal megegyező ε_{kl}^* deformáció lép fel. Ekkor az anyag folytonossága teljesül, az erőegyensúly azonban nem. Behelyettesítve ε_{kl}^* -ot (35)-be, majd az így kapott σ_{ij} -t (32)-be, (34) felhasznál-

lásával a rugalmas állandók Voigt-féle átlagértékére a következő kifejezést kapjuk:

$$\langle C_{ijkl} \rangle_{\text{Voigt}} = \frac{1}{V} \int_V C'_{ijkl} dV. \quad (37)$$

Mivel $\langle C_{ijkl} \rangle_{\text{Voigt}}$ izotrop test tenzora, ezért a (25) összefüggések felhasználásával

$$K_V = \frac{1}{9V} \int_V C'_{iikk} dV, \quad (38)$$

$$\mu_V = \frac{1}{10V} \int_V \left(C'_{ikik} - \frac{1}{3} C'_{iikk} \right) dV. \quad (39)$$

Elvégezve az integrálokban szereplő index összejejtéseket (összegzéseket) a (30) kifejezésben, (29) felhasználásával könnyen beláthatjuk, hogy az integrálban szereplő mennyiségek függetlenek a szemcse orientációjától, vagyis

$$C'_{iikk} = C_{iikk}; \quad C'_{ikik} = C_{ikik}. \quad (40)$$

Ez utóbbi mennyiségek az integrálokból kiemelhetők és így

$$K_V = \frac{1}{9} C_{iikk}; \quad \mu_V = \frac{1}{10} \left(C_{ikik} - \frac{1}{3} C_{iikk} \right). \quad (41)$$

A (6) és (7) összefüggések felhasználásával rombos kristályszerkezet esetén:

$$K_V = \frac{1}{9} [c_{11} + c_{22} + c_{33} + 2(c_{12} + c_{13} + c_{23})], \quad (42)$$

$$\mu_V = \frac{1}{15} [c_{11} + c_{22} + c_{33} - (c_{12} + c_{13} + c_{23}) + 3(c_{44} + c_{55} + c_{66})]. \quad (43)$$

E kifejezések jelentősen egyszerűsödnek köbös kristályokra:

$$K_V = \frac{1}{3} (c_{11} + 2c_{12}); \quad \mu_V = \frac{1}{5} (c_{11} - c_{12} + 3c_{44}). \quad (44)$$

Egy másik átlagolási eljárás *Reuss*-tól származik [18]. Ő azt tételezte fel, hogy a feszültségek egyeznek meg minden szemcsében a σ_{ij}^* makroszkopikus feszültséggel. Ekkor az erő egyensúly teljesül a szemcsehatárok mentén, az anyag folytonossága azonban nem. Ebben az esetben (34) és (35) helyett az alábbi összefüggések írhatók fel:

$$\varepsilon_{ij}^* = \langle S_{ijkl} \rangle \sigma_{kl}^*, \quad (45)$$

$$\varepsilon_{ij} = S'_{ijkl} \sigma_{kl}. \quad (46)$$

Ezekből az előző esettel megegyező gondolatmenet után a (26) kifejezések felhasználásával:

$$\frac{1}{K_R} = S_{iikk}; \quad \frac{1}{\mu_R} = \frac{2}{5} \left(S_{ikik} - \frac{1}{3} S_{iikk} \right), \quad (47)$$

vagy rombos kristályokra:

$$\frac{1}{K_R} = s_{11} + s_{22} + s_{33} + 2(s_{12} + s_{13} + s_{23}), \quad (48)$$

$$\frac{1}{\mu_R} = \frac{1}{15} [4(s_{11} + s_{22} + s_{33} - s_{12} - s_{13} - s_{23}) + 3(s_{44} + s_{55} + s_{66})], \quad (49)$$

végül köbös kristályokra:

$$\frac{1}{K_R} = 3(s_{11} + 2s_{12}); \quad \frac{1}{\mu_R} = \frac{1}{5} [4(s_{11} - s_{12}) + 3s_{44}]. \quad (50)$$

A Voigt és Reuss átlagértékek természetesen csak közelítő adatokat jelentenek a mérhető rugalmas állandókra. A 3. táblázatban három felületcentrált köbös (fcc) fémre adtunk meg adatokat a közelítések pontosságának érzéktetésére. Látható, hogy a Voigt és Reuss átlag jelentősen eltérhet a mért értékektől. Ezen átlagolási módszerek mégis fontosak, mert Hill kimutatta [8], hogy a valóságos polikristály K , μ rugalmas állandói lehetséges értékeinek a Voigt átlag a felső, a Reuss átlag az alsó korlátját adja meg, azaz

$$K_R \leq K \leq K_V; \quad \mu_R \leq \mu \leq \mu_V. \quad (51)$$

Köbös kristályok esetén (15)-ből az alábbi összefüggések nyerhetők:

$$s_{11} + 2s_{12} = \frac{1}{c_{11} + 2c_{12}}; \quad s_{11} - s_{12} = \frac{1}{c_{11} - c_{12}}; \quad s_{44} = \frac{1}{c_{44}}. \quad (52)$$

Látható (44) és (50) alapján, hogy ebben az esetben $K_V = K_R$. Ez (51) miatt azt jelenti, hogy a térfogati rugalmassági moduluszra mindkét átlagolás az egzakt értéket adja köbös kristályok esetén. Ez az eredmény fizikailag nyilvánvaló, ugyanis tiszta hidrosztatikus feszültségek köbös kristályban izotrop térfogatváltozást okoznak, és így ilyen esetben mind a feszültségek, mind a deformációk eloszlása homogén az összes szemcsében. Természetesen ez a megállapítás már nem igaz alacsonyabb szimmetriájú, tehát pl. hexagonális kristály esetén.

Hill rámutatott arra is, hogy a mérhető moduluszokra jó közelítést kapunk, ha a Voigt és Reuss értékek számtani vagy mértani közepével azonosítjuk, tehát pl. a nyírási modulusz esetén

$$\mu \cong \frac{\mu_V + \mu_R}{2} \cong \sqrt{\mu_V \mu_R}. \quad (53)$$

A 3. táblázat adataiból érzékelhetjük ennek a közelítésnek a helyességét.

A 2.1. pontban láttuk, hogy a köbös kristályból az izotrop anyagba való átmenetet a $2c_{44} = c_{11} - c_{12}$ összefüggés jelenti. Ezt felhasználva a köbös kristályok anizotropiáját az alábbi dimenzió nélküli számmal jellemezhetjük:

$$A = \frac{2c_{44}}{c_{11} - c_{12}} - 1, \quad (54)$$

ami nulla izotrop anyagok esetén. A nyírási modulusz Voigt és Reuss átlagának egy

3. TÁBLÁZAT

Néhány (fck) fém szobahőmérsékleti nyírási modulusza (10^{10} N/m²)
Kísérleti adatok: [19]

	Voigt	Reuss	$\frac{\mu_V + \mu_R}{2}$	$\sqrt{\mu_V \cdot \mu_R}$	Θ	Kísérleti
Cu	5,46	3,96	4,71	4,65	4,51	4,51
Ag	3,35	2,59	2,97	2,95	2,88	3,13
Au	3,07	2,38	2,73	2,71	2,67	2,96
Al	2,60	2,58	2,59	2,59	—	2,60

relatív eltérése ezzel a következőképpen fejezhető ki:

$$A^* = \frac{\mu_V - \mu_R}{\mu_V + \mu_R} = \frac{3A^2}{3A^2 + 25(A+1)}. \quad (55)$$

Erősen anizotrop anyagoknál A^* értéke jelentős lehet. Pl. Cu esetén $A=2,273$ és $A^*=15,9\%$, vagy Fe-ra $A=1,408$ és $A^*=9\%$. Egyes gyengén anizotrop anyagoknál pedig az eltérés a két átlagérték között csaknem elhanyagolható. Pl. Al-ra $A=0,217$ és $A^*=0,46\%$.

2.4.2. A nyírási modulusz meghatározása a Debye hőmérsékletből

A rácsrezgésekből származó fajhő elméletében a Debye hőmérséklet definíciója [20]:

$$\Theta = \frac{\hbar \omega_m}{k}, \quad (56)$$

ahol \hbar a Planck állandó és 2π hányadosa, k a Boltzmann állandó és ω_m a levágási frekvencia. ω_m kifejezhető a rugalmas hullámok átlagos fázis sebességével:

$$\omega_m^3 = \frac{6\pi^2}{\Omega} \langle v \rangle^3, \quad (57)$$

ahol Ω az atomtérfogat és [21]:

$$\langle v \rangle = \left[\frac{1}{12\pi} \int_V \left(\sum_{i=1}^3 \frac{1}{v_i^3} \right) dV \right]^{-1/3}. \quad (58)$$

Itt v_i -k a monokromatikus síkhullámok fázis sebességét jelentik.

Izotrop polikristályos anyagokra:

$$\langle v \rangle = \left[\frac{1}{3} \frac{1}{v_l^3} + \frac{2}{3} \frac{1}{v_t^3} \right]^{-1/3}, \quad (59)$$

ahol

$$v_t = \sqrt{\frac{\mu}{\varrho}}; \quad v_l = \sqrt{\frac{K + \frac{4}{3}\mu}{\varrho}} \quad (60)$$

a transzverzális, illetve longitudinális hullámok sebessége.

Ha feltételezzük, hogy a Θ értéke ugyanaz egykristályra és polikristályra (azaz a szemcsehatárok nem változtatják meg lényegesen az átlagos rácsrezgéseket), akkor az előző egyenletekből μ és Θ között az alábbi összefüggést kapjuk:

$$\left(K + \frac{4}{3}\mu\right)^{-3/2} + 2\mu^{-3/2} = \frac{18\pi^2}{\Omega\varrho^{3/2}} \left(\frac{\hbar}{k\Theta}\right)^3. \quad (61)$$

Ebből Θ ismeretében μ iterációval kiszámítható. Így kapott nyírási modulusz értékeket [21] a 3. táblázat tartalmaz.

3. Polikristályok képlékeny alakváltozása

A kristályos anyagok képlékeny alakváltozása csúszások által megy végbe [22, 23] (az ikerképződéses alakváltozás csak extrém körülmények között válik lényegessé [24]). Egykristály esetén a csúszás feltétele az, hogy egy adott csúszási rendszerben, a csúszási síkban, a csúszási irányban ható feszültség elérjen egy kritikus τ_r értéket, az adott csúszási rendszerre vonatkozó csúszási folyáshatárt (resolved shear stress). Ha egykristályt egytengelyű nyújtásnak vetünk alá, akkor az egyszeres csúszás feltétele a következő [22, 23]:

$$\sigma = \frac{1}{\cos \Theta_0 \cos \lambda_0} \tau_r = m_\sigma(\Theta_0, \lambda_0) \tau_r, \quad (62)$$

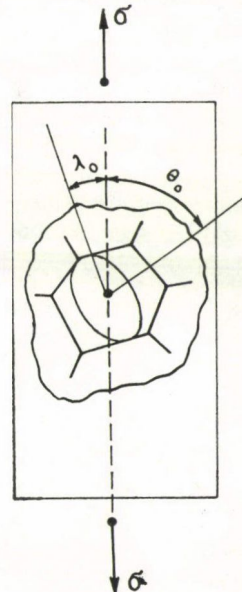
ahol σ az alkalmazott külső feszültség, Θ_0 , illetve λ_0 a külső erő iránya és a csúszási sík normálisa, illetve a csúszási irány által bezárt szög. Az egytengelyű nyújtásra jellemző $1/m_\sigma$ iránytényezőt Schmid faktornak nevezzük.

Polikristály tiszta nyújtásakor a folyás feltételének meghatározásához a (62) összefüggésben a Schmid faktort az összes lehetséges csúszási rendszerre (1. ábra) átlagolni kell. Az átlagérték ismeretében a kritikus csúsztató feszültség és a folyást megindító külső feszültség (folyáshatár) közötti összefüggés a

$$\sigma = \bar{m}_\sigma \tau_r \quad (63)$$

alakban adható meg.

Összefüggést találhatunk a nyújtási deformáció növekménye és az egyes csúszási rendszerekben aktiválódó csúszások összességét jellemző $d\gamma_r$ nyírási deformáció (resolved shear strain) növekmény között is. A teljes makroszkopikus deformáció ugyanis tiszta $d\gamma_r^k$ nyírásokból épül fel,



1. ábra. A Schmid faktor átlagértékének meghatározásához

ezért az alakítás során végzett plasztikus munkáknak egyenlőknek kell lenniük, azaz

$$\sigma d\epsilon = \sum_k \tau_r^k d\gamma_r^k, \quad (64)$$

ahol a k index a k -adik aktivált csúszási rendszert jelzi. Ha feltesszük, hogy a kritikus csúsztató feszültség valamennyi aktivált csúszási rendszerben ugyanaz, és bevezetjük az összes nyírásra a

$$d\gamma_r = \sum_k d\gamma_r^k \quad (65)$$

jelölést, akkor (63) és (64)-ből kapjuk, hogy

$$d\gamma_r = \bar{m}_\sigma d\epsilon. \quad (66)$$

Ha feltesszük még azt is, hogy \bar{m}_σ nem változik a deformáció során, akkor

$$\gamma_r = \bar{m}_\sigma \epsilon. \quad (67)$$

A fenti megfontolásból kitűnik, hogy a polikristály és a megfelelő egykristály képlékeny tulajdonságai közötti kapcsolat meghatározása ismét alkalmas átlagolási módszerek kidolgozását igényli. A Schmid faktorra egy-egy átlagértéket tiszta nyújtásra először *Sachs* [25] és *Taylor* [26] határozott meg.

3.1. Polikristály képlékeny alakváltozásának feltételei

A tapasztalat szerint a polikristályokon jelentős képlékeny alakváltozások hozhatók létre az anyag folytonosságának fennmaradása mellett. Ezért tetszőleges külső erők hatására létrejövő alakváltozás során a szemcsehatárok mentén teljesülniük kell az alábbi feltételeknek:

1. a szomszédos szemcsékben működő feszültségek a határok mentén egyenlőben vannak,
2. a határok mentén az anyag folytonos marad.

Az utóbbi feltétel miatt a legegyszerűbb alakítás (egy tengelyű nyújtás) során is egy-egy kiszemelt szemcse bonyolult alakváltozást szenved. Ezért az alakváltozás növekedése általában csak a teljes deformációs tenzor megváltozásával jellemezhető, azaz

$$\delta \tilde{\epsilon} = \begin{pmatrix} \delta \epsilon_{xx} & \delta \epsilon_{xy} & \delta \epsilon_{xz} \\ \delta \epsilon_{yx} & \delta \epsilon_{yy} & \delta \epsilon_{yz} \\ \delta \epsilon_{zx} & \delta \epsilon_{zy} & \delta \epsilon_{zz} \end{pmatrix}. \quad (68)$$

A képlékeny alakváltozás a nyírási jellege miatt nem jár térfogatváltozással, ezért

$$\delta \epsilon_{xx} + \delta \epsilon_{yy} + \delta \epsilon_{zz} = 0. \quad (69)$$

Mivel a deformációs tenzor szimmetrikus, ezért hat független eleme van, amelyekből ez utóbbi összefüggés egyet meghatároz. Ez azt jelenti, hogy egy szemcse általános alakváltozása öt független deformáció komponenssel adható meg, amelyek megjelenése öt különböző csúszási rendszer aktiválásával valósulhat meg. A polikristályok képlékeny alakváltozása tehát az egyes szemcsékben általában öt csúszási rendszer egyidejű aktiválását teszi szükségessé.

Az öt csúszási rendszer egyidejű aktiválása miatt a szomszédok hatására az egyes szemcsékben egy $\tilde{\sigma}$ tenzorral jellemezhető, összetett feszültségek alakulnak ki. Ezek teljesítik a szemcsehatárok mentén az 1) egyensúlyi feltételt és az összes szemcsére vett átlagértékük megadja a külső erők által meghatározott makroszkopikus feszültség-állapotot, azaz pl. a z tengely irányú nyújtás esetén:

$$\langle \tilde{\sigma} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \tilde{\sigma} dV = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma \end{pmatrix}. \quad (70)$$

3.2. Összefüggés egykristály folyáshatára és a kritikus csúsztató feszültség között

Felületcentrált köbös (fcc) kristályokban a domináns csúszási rendszerek: $\{111\}$ $\langle 110 \rangle$, amelyekkel egyenértékűek a tércentrált köbös (tck) kristályok $\{110\}$ $\langle 111 \rangle$ csúszási rendszerei. Az fcc kristályok csúszási rendszereit a 4. táblázat tartalmazza.

4. TÁBLÁZAT

Fcc kristályok csúszási rendszerei

Csúszási sík	111	111	111	111
Csúszási irány	01 $\bar{1}$ 101 1 $\bar{1}$ 0	0 $\bar{1}$ $\bar{1}$ 101 1 $\bar{1}$ 0	01 $\bar{1}$ 101 1 $\bar{1}$ 0	0 $\bar{1}$ $\bar{1}$ 101 110

Egy kristály tetszőleges alakváltozása létrehozható bármely tetszőlegesen kiválasztott öt csúszási rendszerben kialakított csúszásokkal. Köbös kristályok esetén ez $\binom{12}{5} = 792$ lehetséges választást jelent. Bizonyos csúszási rendszerekbeli elcsúszások azonban egymással egyenértékűek, amelyek alapján *Bishop* és *Hill* megmutatta, hogy a független választások száma 384 [27].

Nyilvánvaló, hogy egy egykristály általános alakváltozásakor ténylegesen aktiválódó öt csúszási rendszer kiválasztásához meghatározott kritériumnak kell teljesülnie. Tegyük fel, hogy a próbatesten $\delta\epsilon_{ij}$ deformáció növekmény jön létre σ_{ij} feszültség hatására. Ekkor a plasztikus munka térfogategységenként $\sigma_{ij}\delta\epsilon_{ij}$. Legyen τ_k^* a k -adik csúszási rendszerben ekkor működő csúsztató feszültség és legyen $\delta\gamma_k^*$ az a nyírási deformáció, amelynek ebben a rendszerben kellene kialakulnia a $\delta\epsilon_{ij}$ deformáció növekményéhez, ha a k -adik rendszer a kiválasztott öt között lenne. Tetszőleges öt csúszási rendszert így kiválasztva, az egyes rendszerekben kialakuló nyírásokat a plasztikus munkák egyenlősége szabja meg, azaz

$$\sum_k \tau_k^* \delta\gamma_k^* = \sigma_{ij} \delta\epsilon_{ij}, \quad (71)$$

ahol a k szerinti összegzés az öt kiválasztott csúszási rendszerre vonatkozik.

Tegyük fel most, hogy az az öt csúszási rendszer aktiválódik ténylegesen, amelyekben a csúsztató feszültség először és egyidejűleg eléri a kritikus értéket. Ez utóbbi

legyen mind az öt rendszerben ugyanaz a τ_r , és a fellépő nyírásokat jelölje $\delta\gamma_l$. Ezek nagyságát ugyancsak a plasztikus munkák egyenlősége szabja meg, azaz

$$\tau_r \sum_l \delta\gamma_l = \sigma_{ij} \delta\epsilon_{ij}, \quad (72)$$

ahol az l szerinti összegzés az öt aktivált rendszerre vonatkozik. Nyilvánvaló, hogy bármely csúszási rendszerben

$$\tau_k^* \leq \tau_r,$$

ahol az egyenlőség csak az aktivált rendszerekre érvényes. Beszorozva ezt az egyenlőséget $\delta\gamma_k^*$ -gal és összegezve a tetszőlegesen kiválasztott öt rendszerre, a következő egyenlőtlenségre jutunk:

$$\sum_k \tau_k^* \delta\gamma_k^* \leq \tau_r \sum_k \delta\gamma_k^*. \quad (73)$$

Ebből a (71), (72) összefüggések felhasználásával:

$$\sum_l \delta\gamma_l \leq \sum_k \delta\gamma_k^*. \quad (74)$$

Eredményünk azt jelenti, hogy a tett feltevések mellett az az öt csúszási rendszer aktiválódik ténylegesen, amelyek esetén a $\delta\epsilon_{ij}$ deformáció növekmény minimális csúszásokkal jöhet létre. Ezt a kritériumot *Taylor* vezette be [26]. Látható, hogy ez a kritérium annak a feltevésnek a következménye, hogy az aktivált csúszási rendszerekben (ugyanaz) a kritikus csúsztató feszültség működik.

Tegyük fel, hogy a külső erők által létrehozott feszültségállapot a feszültségtenzor egy komponensével jellemezhető. Ekkor (72) jobb oldalán csak egy tag szerepel és így

$$\frac{\sigma_{ij}}{\tau_r} = \frac{\sum_l \delta\gamma_l}{\delta\epsilon_{ij}} = \frac{\delta W}{\tau_r \delta\epsilon_{ij}} = m, \quad (75)$$

ahol δW a plasztikus munka. Az itt bevezetett m paraméter kapcsolja össze a többszörös csúszással megvalósítható alakváltozáshoz szükséges külső feszültséget a kritikus csúsztató feszültséggel, hasonlóan az egyszerű nyújtásra vonatkozó Schmid faktorhoz. m értéke a vizsgált anyag plasztikus anizotrópiáját jellemzi, azaz azt, hogy hogyan függ a folyás megindításához szükséges külső feszültség adott τ_r esetén a kristályhoz képesti orientációjától.

A Taylor kritérium lehetőséget ad arra, hogy a lehetséges csúszási rendszerekből kiválasszuk a ténylegesen aktiválódókat adott alakváltozás esetén. Nyitva marad azonban még az a kérdés, hogy milyen feszültségállapotnak kell a kristályban kialakulnia ahhoz, hogy a Taylor kritérium teljesüljön.

A kérdés a Taylor kritériumtól függetlenül is felvethető. Milyen feszültségállapot szükséges ahhoz, hogy egy egykristályon $\delta\epsilon_{ij}$ alakváltozás jöjjön létre? A kérdést *Bishop* és *Hill* vetette fel először [27, 28].

Legyen egy adott feszültségállapotot jellemző tenzor a kristálytengelyekhez rögzített koordináta-rendszerben σ_{ij} . Legyen egy kiszemelt csúszási rendszerben a csúszási sík normálisa \mathbf{n} és a csúszási irányt meghatározó egységvektor \mathbf{b} . A kérdéses rendszerben működő csúsztató feszültség:

$$\tau = \sigma_{ij} b_i n_j. \quad (76)$$

A feladat az, hogy meghatározzuk azokat a feszültségállapotokat (feszültségtenzorokat), amelyek esetén legalább öt csúszási rendszerben azonos csúsztató feszültségek működnek. Felhasználva, hogy **b** és **n** merőlegesek egymásra, továbbá, hogy a hidrosztatikai feszültségek csúszások kialakításában nem vesznek részt, Bishop és Hill megmutatta, hogy köbös kristályokban 56 olyan különböző feszültségállapot létezik, amelyek esetén hat, illetve nyolc csúszási rendszerben a csúsztató feszültségek egyidejűleg elérhetik a kritikus értéket [27].

A további feladat az, hogy olyan feltételt adjunk meg, amelynek alapján a lehetséges feszültségállapotokból kiválaszthatjuk azt, amely létrehozza a megkívánt $\delta\epsilon_{ij}$ alakváltozás növekményt. Nyilvánvaló, hogy az így meghatározott feszültségtenzor komponensek közötti összefüggés a kérdéses alakváltozásra vonatkozó folyásfelületet [29] adja meg.

A valóságos feszültségállapot kiválasztására Bishop és Hill bevezette a maximális plasztikus munka elvét [27, 28]. Eszerint egy előírt $\delta\epsilon_{ij}$ alakváltozás növekmény olyan σ_{ij}^* feszültségállapot mellett valósul meg, amelyre a

$$\delta W = \sigma_{ij}^* \delta\epsilon_{ij} = \max. \quad (77)$$

Az elv alapján a ténylegesen aktiválódó csúszási rendszerek is meghatározhatók. Ugyanis az 56 lehetséges feszültségállapothoz meghatározott aktiválható csúszási rendszerek tartoznak. Ha tehát kiválasztjuk a maximális plasztikus munkát eredményező feszültségállapotot és a hozzá tartozó csúszási rendszereket, akkor ez utóbbiakat egyértelműen meghatározzuk. Érdekes és fontos eredmény, hogy az így adódó csúszási rendszerek megegyeznek a Taylor kritérium alapján kapottakkal. Ez megadja a választ az előzőkben felvetett kérdésre is. *Adott $\delta\epsilon_{ij}$ deformáció növekmény olyan aktivált csúszási rendszerek és feszültségállapot esetén jön létre, amikor a szükséges nyírások összege minimális és a plasztikus munka maximális.*

A két kritérium egyike is elegendő az aktivált csúszási rendszerek kiválasztására. A maximális plasztikus munka elvének alkalmazása azonban előnyösebb, mert csak 56 esetre kell a plasztikus munka értékét megvizsgálni, míg a Taylor kritérium alkalmazásakor a nyírások összegét 384 esetre kell meghatározni.

3.3. Összefüggés polikristály folyáshatára és a kritikus csúsztató feszültség között

A polikristály adott külső terhelés melletti makroszkopikus folyáshatára és az egyes szemcsékben azonosnak feltételezett kritikus csúsztató feszültség közötti összefüggés egzakt meghatározása elvileg lehetséges az előző pontban meghatározott egykristályra érvényes összefüggések polikristályra vonatkozó átlagolásával. Ehhez azonban ismernünk kellene az egyes szemcsék pontos alakváltozását és vagy az ehhez tartozó minimális nyírásokat, vagy a maximális plasztikus munkát eredményező feszültségállapotot. Ezek meghatározása valamennyi szemcsére gyakorlatilag lehetetlen, ezért az átlagolás csak közelítőleg valósítható meg.

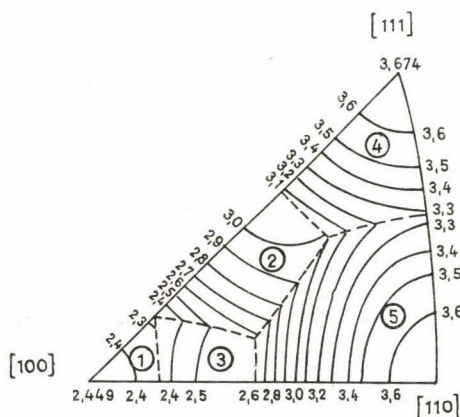
Tegyük fel, hogy valamennyi szemcse, orientációjától függetlenül, a makroszkopikussal megegyező deformációt szenved. Ekkor a 3.1. pontban megadott feltételek közül az anyag folytonossága teljesül, de az erő egyensúly nem. A különböző orientációjú szemcsék ugyanazon alakváltozásához ugyanis két szomszédos szemcsében

a feszültség ugrásszerűen meg kell, hogy változzon. Ha feltesszük, hogy ez a közelítés elhanyagolható eltérést eredményez, akkor az átlagolás már elvégezhető. Ekkor az egyes szemcsék úgy tekinthetők, mintha az alakváltozásuk a többitől függetlenül menne végbe, úgy, hogy az egyes szemcséken működő erők eredője a külső erőkkel egyenlő.

Pl. tiszta nyújtás esetén az egyes szemcsékre alkalmazható a (75) alatti definíció. A kristálytengelyekhez képesti összes lehetséges nyújtási irány a standard stereografikus háromszög pontjaival adható meg. Az egyes nyújtási irányokhoz tartozó m értékeket a 2. ábra mutatja [30]. Feltéve, hogy valamennyi szemcseorientáció azonos valószínűségű, m átlagértéke meghatározható. Lényegében ezt a számítást végezte el Taylor és eredményül $\bar{m}=3,06$ értéket kapott [26]. Ez azt jelenti, hogy ha az egyes kristallitokban, mint egykristályokban a kritikus csúsztató feszültség τ_r , akkor a polikristály makroszkopikus nyújtási folyáshatára:

$$\sigma = 3,06\tau_r \cong 3\tau_r. \quad (78)$$

Ilyen kapcsolatot a polikristály és egykristály paraméterek között először Sachs adott meg [25]. Feltételezte, hogy az egyes kristallitok alakváltozása a legkedvezőbb



2. ábra. A többszörös csúszás m faktora egykristály különböző irányú nyújtása során

helyzetű csúszási rendszer aktiválásával (azaz egyszeres csúszással) következik be. Minden szemcsén a külsővel azonos irányú és olyan nagyságú erő működik, amely aktiválja a legkedvezőbb helyzetű csúszási rendszert. Az erők eredője megegyezik a külső erővel. Ezen feltevések alapján Sachs lényegében a (62) alatti iránytényező átlagértékét határozta meg és eredményül $\bar{m}_s=2,24$ -et kapott. A tapasztalattal azonban a (78) alatti faktor egyezik meg, ami igazolja, hogy a szemcsékben többszörös csúszásnak kell kialakulnia. Nyilvánvaló továbbá, hogy a Sachs modell esetén sem az anyagfolytonosság, sem a feszültségek egyensúlya nem teljesül.

Az átlagolás általában a maximális plasztikus munka elve alapján is elvégezhető. Mivel az egyes szemcsék alakválto-

zása a feltevés szerint egymástól független és megegyezik a makroszkopikus $\delta\epsilon_{ij}$ -vel, ezért (77) felhasználásával

$$\sigma_{ij}\delta\epsilon_{ij} = \int \sigma_{ij}^* \delta\epsilon_{ij} dV = \delta\epsilon_{ij} \int \sigma_{ij}^* dV, \quad (79)$$

ahol σ_{ij} a külső feszültség és az integrál a próbatest egységnyi térfogatára veendő. Ez utóbbi az egyes (különböző orientációjú) szemcsék azonos alakváltozását maximális plasztikus munkával megvalósító feszültségek átlagértéke.

Legyen a mintához rögzített koordináta-rendszerrel összeeső kristálytani tengelyű szemcsében a maximális plasztikus munkához szükséges feszültség σ_{ij}^0 . Akkor egy tetszőleges szemcséhez tartozó feszültség a kristálytani tengelyek elforgatását jellemző transzformációs mátrixokkal adható meg, azaz

$$\sigma_{ij}^* = \alpha_{il} \alpha_{jk} \sigma_{lk}^0,$$

vagy a megfelelő plasztikus munka:

$$\delta W = \alpha_{il} \alpha_{jk} \sigma_{lk}^0 \delta \varepsilon_{ij} = \sigma_{lk}^0 \alpha_{il} \alpha_{jk} \delta \varepsilon_{ij}. \quad (80)$$

Ezen utóbbi kifejezés alapján az egyes szemcsékhez tartozó plasztikus munka orientáció függése felfogható úgy, mintha a szemcsék mind azonos orientációjúak lennének és a kristálytani tengelyekhez képest elforgatott koordináta-rendszerekben hoznánk létre azonos deformációkat. Ha a deformációs tenzor főtengeleyeinek helyzetét a $(\vartheta, \varphi, \psi)$ Euler szögekkel adjuk meg, akkor az átlagolás a következő integrál numerikus kiszámítását igényli [27]:

$$\frac{\iiint \delta W(\vartheta, \varphi, \psi) \sin \vartheta \, d\varphi \, d\psi \, d\vartheta}{\iiint \sin \vartheta \, d\vartheta \, d\varphi \, d\psi} = \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij}, \quad (81)$$

ahol

$$0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{4}; \quad 0 \leq \text{ctg } \vartheta \leq \sin \varphi; \quad 0 \leq \psi \leq \pi.$$

Bishop és Hill véletlenszerű szemcseorientáció esetén a (81) integrál kiszámításával tiszta nyújtásra a (78) alatti Taylor-faktort kapta meg, míg tiszta nyírás esetén a

$$\tau = 1,65 \tau_r \quad (82)$$

összefüggésre jutott. Ez az összefüggés közel van a Mises-féle összefüggéshez [29].

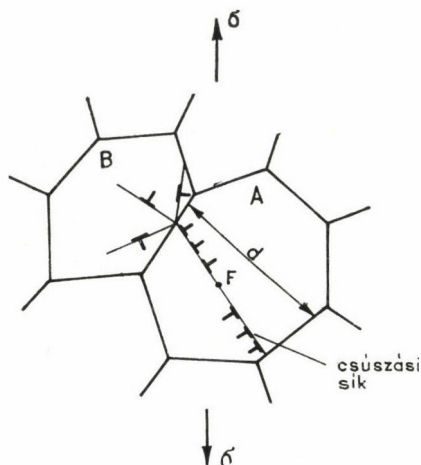
3.4. A folyáshatár függése a szemcsemérettől

A polikristályok képlékeny alakváltozásával kapcsolatos modellek csak a legalapvetőbb tulajdonságokat jellemzik. A polikristályok alakváltozásának pontos mechanizmusa még ma is vitatott kérdés [31]. Nem világos pontosan, hogy az egy-szeres, vagy többszörös csúszásnak van-e jelentősebb szerepe az alakváltozás megindulásában.

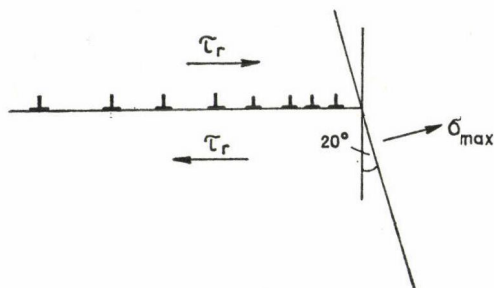
Az alakváltozás kialakulásának mechanizmusa közelítőleg a következőképpen adható meg. Ha a polikristályos próbatestet fokozatosan növekvő terhelésnek vetjük alá, akkor egy kiszemelt szemcsében először a legkedvezőbb orientációjú csúszási rendszerben elérjük a kritikus csúsztató feszültséget. Ha ezen csúszási rendszerhez tartozó valamelyik csúszási síkban egy Frank—Read-forrás [22] van, akkor ez kibocsát egy sorozat diszlokációhurokot (3. ábra, A szemcse). Az ezekkel kapcsolatos elcsúszások a szomszédos szemcsékre rugalmas deformációkat kényszerítenek. Kezdetben ez utóbbiak révén marad fenn az anyag folytonossága, vagy másszóval a deformációk kompatibilitása. A növekvő külső erők hatására a forrás egyre nagyobb számú diszlokációt bocsát ki, amelyek a szemcsehatáron elakadva egy feltorlódott diszlokáció sorozatot képeznek (4. ábra). E diszlokáció sorozat feszültségterében a csúszósíkkal 20°-os szöget bezáró síkban maximális húzófeszültség ébred, amelynek nagysága [22, 23]:

$$\sigma_{\max} \cong n \tau_r, \quad (83)$$

ahol τ_r a forráshoz tartozó csúszósíkban működő csúsztató feszültség és n a feltorlódott (a forrás által kibocsátott) diszlokációk száma. Adott τ_r esetén a forrás műkö-



3. ábra. Frank—Read forrás (F) működése egy kiszemelt szemcse legkedvezőbb orientációjú csúszási rendszerében



4. ábra. Feltorlódott diszlokáció halmaz

dése olyan n számú diszlokációhurok kibocsátása után áll le (a diszlokációk feszültségterének akadályozó hatása miatt), amelynek nagysága [22, 23]:

$$n \cong \frac{\pi(1-\nu)d}{\mu b} \tau_r, \quad (84)$$

ahol ν a Poisson-szám, μ a nyírási modulusz, b a diszlokációk Burgers vektora és d a feltorlódott halmaz átmérője, amely a jelen esetben az átlagos szemcsemérettel azonosítható. (83) és (84)-ből:

$$\sigma_{\max} = \frac{\pi(1-\nu)}{\mu b} \tau_r^2 d. \quad (85)$$

Ez a feszültség a B szemcsében többszörös csúszást aktiválhat egy kritikus érték elérése után. Nyilvánvaló, hogy az A szemcse kezdetben egyszeres csúszással bekövetkező alakváltozásának a B csak többszörös csúszással tud helyet adni a különböző orientációja miatt. A makroszkópikus alakváltozás megindulását ezért ahhoz a σ külső feszültséghez (folyáshatárhoz) kell hozzákapcsolnunk, amikor σ_{\max} eléri a többszörös csúszás beindításához szükséges kritikus értéket. Mivel az előzők alapján az egyes szemcsékben működő átlagos kritikus csúsztatófeszültség $\tau_r = \sigma/\bar{m}$, így (85)-ből a folyáshatár:

$$\sigma = \sigma_0 + Kd^{-1/2}, \quad (86)$$

ahol K a (85)-ben szereplő paramétereket és az \bar{m} faktort tartalmazó állandó, és σ_0 az egykristály folyáshatára.

A (86) összefüggés a jól ismert Hall—Petch egyenlet. Ennek az előzőekben vázolt egyszerű levezetése világosan mutatja azt, hogy az egyszeres csúszás mintegy előfeltétele az alakváltozás kialakulásának, de makroszkópusan észlelhető alakváltozás, amikor a deformációk kompatibilitását már a szemcsék képlékeny alakváltozása biztosítja, csak a többszörös csúszás beindulása után jöhet létre.

3.5. Polikristály alakítási keményedése

A polikristályok alakítási keményedésének lényeges vonásai kis és közepes alakításoknál az egykristályokéval megegyeznek. Lényeges eltérés csak abban van, hogy mivel a polikristályok csak többszörös csúszással alakíthatók, így az egykristályokra jellemző egyszeres csúszással kapcsolatos I. szakasz polikristályokon nem figyelhető meg.

Tiszta nyújtás esetén a Taylor-faktor segítségével kapcsolatot létesíthetünk az egykristály és polikristály alakítási keményedése között. Ha az egykristály

$$\tau_r = f(\gamma_r)$$

feszültség-deformáció összefüggése ismert, akkor a (63) és (67) összefüggéseket a Taylor faktorról alkalmazva megkaphatjuk a polikristályra vonatkozó összefüggést a

$$\sigma = \bar{m}f(\gamma_r) = \bar{m}f(\bar{m}\varepsilon)$$

alakban.

Nagy alakváltozásoknál a polikristályok az egykristályokhoz képest új sajátságokat is mutatnak [29], amelyek részleteivel e cikksorozat egy másik dolgozata foglalkozik [32].

A szemcseszerkezet alakítási keményedést befolyásoló egyéb hatásainak elméleti értelmezésére *Tasnádi és Rajkovits* dolgozatában találhatunk további részleteket [33]

4. Összefoglalás

Áttekintést adtunk a polikristályos testek rugalmas és képlékeny tulajdonságairól. Célunk elsősorban az volt, hogy bemutassuk azokat a módszereket, amelyekkel a polikristályok tulajdonságai az egykristályokéból lezármasztathatók. Ezek a kérdések alapvető fontosságúak, mivel a gyakorlatban felhasznált anyagok ritka kivételtől eltekintve mindig polikristályok. Ennek ellenére e területen még ma is számos kellően meg nem értett problémakör létezik.

IRODALOM

1. Chatel P. és Kovács I., Magyar Fizikai Folyóirat, 13, 411, 1966.
2. C. Kittel, Bevezetés a szilárdtest-fizikába, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1981. p. 25.
3. T. D. Sermergor, Teorija uprugosztyi mikroneodnornognüh szred, Nauka, Moszkva, 1977. p. 33.
4. J. Cook, Brit. J. Appl. Phys. 1, 799, 1968.
5. H. J. Bunge, Kristall und Technik, 9, 413, 1974.
6. E. Kröner and H. H. Wawra, Phil. Mag. A38, 433, 1978.
7. Jánossy L. és Tasnádi P., Vektorszámitás I., Vektor- és tenzoralgebra, Tankönyvkiadó, Budapest, 1980. p. 99.
8. R. Hill, Proc. Phys. Soc. Lond. A65, 349, 1952.
9. A. V. Hershey, J. Appl. Mech. 21, 236, 1954.
10. E. Kröner, Z. Phys. 151, 504, 1958.
11. J. D. Eshelby, Progress in Solid Mechanics, Vol. II. eds. I. N. Sneddon and R. Hill, North-Holland, Amsterdam, 1961. p. 130.
12. Z. Hashin and S. Shtrikman, J. Mech. Phys. Solids, 10, 343, 1962.
13. K. S. Alexandrov, Sov. Phys. Dokl. 10, 893, 1965.
14. E. Kröner, J. Mech. Phys. Solids, 15, 319, 1967.
15. E. Kröner, J. Mech. Phys. Solids, 25, 137, 1977.

16. E. Kröner, J. Phys. F: Metal Phys. 8, 2261, 1978.
17. W. Voigt, Lehrbuch der Kristallphysik, Teubner, Leipzig, 1928.
18. A. Reuss, Z. Angew. Math. Phys. 9, 49, 1929.
19. Metals, Thermal and Mechanical Data, Pergamon Press, Oxford, 1969. p. 82.
20. C. Kittel, Bevezetés a szilárdtest-fizikába, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1981. p. 153.
21. H. M. Ledbetter and E. R. Naimon, J. Appl. Phys. 45, 66, 1974.
22. Kovács I. és Zsoldos L., Diszlokációk és képlékeny alakváltozás, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1965.
23. I. Kovács and L. Zsoldos, Dislocations and Plastic Deformation, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1973.
24. L. Rémy, Met. Trans. 12A, 387, 1981.
25. G. Sachs, Z. d. Ver. deut. Ing. 72, 734, 1928.
26. G. I. Taylor, J. Inst. Met. 62, 307, 1938.
27. J. W. Bishop and R. Hill, Phil. Mag. 42, 1298, 1951.
28. J. W. Bishop and R. Hill, Phil. Mag. 42, 414, 1951.
29. Kovács I., Magyar Fizikai Folyóirat, 25, 113, 1977.
30. G. Y. Chin and W. L. Mammel, Trans. Met. Soc. AIME, 239, 1400, 1967.
31. Proc. Second Rysø Int. Symp. on Metallurgy and Mat. Science, Deformations of Polycrystals: Mechanisms and Microstructure, 14—18. Sept. 1981. eds. N. Hansen et al., Rysø National Laboratory, 1981.
32. S. Tóth L., Magyar Fizikai Folyóirat, jelen cikksorozat.
33. Tasnádi P. és Rajkovits Zs., Magyar Fizikai Folyóirat 29, 235, 1981.

5. ALAKÍTÁS ÖSSZENYOMÁSSAL

RAJKOVITS ZSUZSA

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOM

1. Bevezetés	429
2. Összenyomás nagy alakítások esetén	430
3. Az összenyomási deformáció mikromechanizmusai	433
3.1. Magas hőmérsékleti ($T > 0,6T_m$) összenyomás mikromechanizmusai	433
3.2. Az alacsony hőmérsékleti összenyomás mikromechanizmusai	435
4. A mikroszerkezet változása nagy deformációk esetén	438
4.1. A szemcseszerkezet változása	438
4.1.1. Inhomogenitások a deformált szerkezetben	439
4.2. A szubszerkezet kialakulása	439
5. Összefoglalás	442

1. Bevezetés

A kristályos anyagok alakítási keményedésének eredete a mechanikai fémtan egyik jól megértett területe. Az alakítási keményedés a diszlokációk sokszorozódásával, kölcsönhatásával és rögzülésével, mint szilárdságnövelő mechanizmusokkal és a lágyulást jelentő dinamikus megújulással (diszlokáció eltűnéssel) értelmezhető.

Magas homológ hőmérsékleteken ($T > 0,5T_m$, ahol T_m az olvadáspont) az alakítási keményedés egyensúlyi folyásfeszültségre vezet. Az egyensúlyi folyásfeszültség elérése után a további alakítás során nem keményedik az anyag [1]. A plasztikus folyás ezen tartománya egyenletes méretű szubszerkezettel jellemezhető, melynél az egyensúlyi szubszemcseméret a folyásfeszültség függvénye.

Alacsony homológ hőmérsékleteken ($T < 0,5T_m$) a deformációs folyamatra a monoton alakítási keményedés a jellemző és az egyensúlyi folyásfeszültség általában nem érhető el [2]. Alacsony hőmérsékleti deformáció esetén az anyag ugyanis eltörik még mielőtt jelentős mértékű alakítást érnénk el. Az alakítási keményedési görbe részletes analiziséhez azonban ismernünk kell a feszültség-deformáció görbét minél szélesebb deformációtartományban. Ez csak alkalmas deformációs mód megválasztásával érhető el.

A $\sigma-\varepsilon$ görbe kezdeti szakaszait nyújtás vizsgálatokkal elég részletesen tanulmányozták. A parabolikus szakasztól kezdve, s főleg a IV. szakasz (telítés) vizsgálatához azonban már nagy mértékű alakítások szükségesek. Az egytengelyű nyújtás során már viszonylag kis deformációk után elszakad az anyag. E deformálási módnál nehézséget jelent a nyakasodás is. A nyakasodás környezetében ugyanis háromtengelyű feszültségállapotot kell figyelembe vennünk, s a nyakasodás forrása lehet instabilitásoknak is [3].

A dróthúzás egy lehetséges módja ugyan a nagy mértékű alakításnak, de a folyamatos húzás miatt a minta geometriája állandóan változik. A geometria változása az anyag szilárdságának és mikroszerkezetének alakulására is hatással van, ezért nehezíti a $\sigma-\varepsilon$ görbe analízisét [1].

A csavarás és az egytengelyű összenyomás két további deformációs mód, melyekkel nagy deformációkat érhetünk el. Csavarási deformáció során a minta keresztmetszetében a tengelytől a széle felé feszültség és deformáció gradienssel kell számolnunk, ha nem csőszerű mintát deformálunk. Csőszerű minta alakításakor viszont a kihajlás jelenthet nehézséget az alakítási keményedés kiértékelésekor [4].

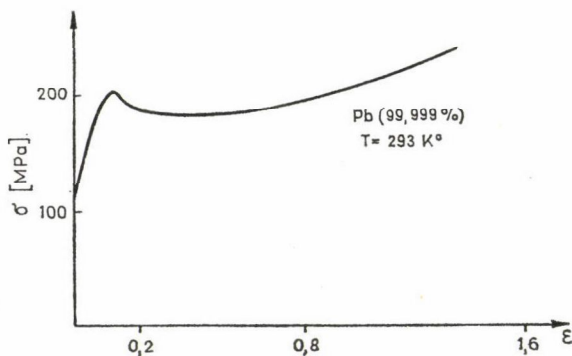
A nyomó fej és a minta közötti súrlódás miatt az egytengelyű összenyomás esetén sem homogén a minta alakváltozása, de a súrlódás különböző kenőanyagok alkalmazásával minimálisra csökkenthető. A folyamatos összenyomás során a minta magassága és átmérője változik. A magasság-átmérő (h/d) arány változása a $\sigma-\varepsilon$ görbe menetét befolyásolja [5]. A magasság-átmérő arány változásának hatása nagy alakítások esetén jelentős.

A folyamatos összenyomást megszakítva, a magasság átmérő arány megváltozását megmunkálással megszüntethetjük, így ez a zavaró tényező kiküszöbölhető. Az egytengelyű összenyomás tehát alkalmas deformációs mód az alacsony hőmérsékleteken végzett nagy alakítások vizsgálatára.

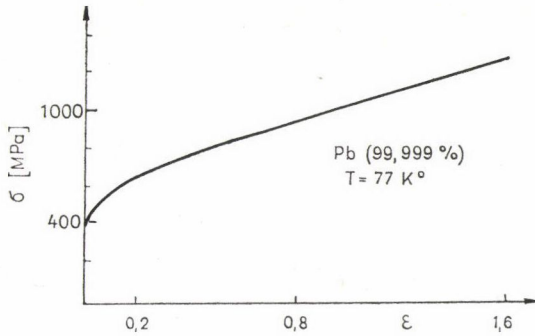
2. Összenyomás nagy alakítások esetén

Magas homológ hőmérsékleten végzett összenyomási deformációra jellemző a deformációs lágyulás. Az 1. ábrán szobahőmérsékleten alakított ólom feszültség deformáció grafikonját láthatjuk. A grafikon jellegzetessége a deformáció alatt lejátszódó termikusan aktivált folyamatok eredményeként bekövetkező folyásfeszültség csökkenés [6].

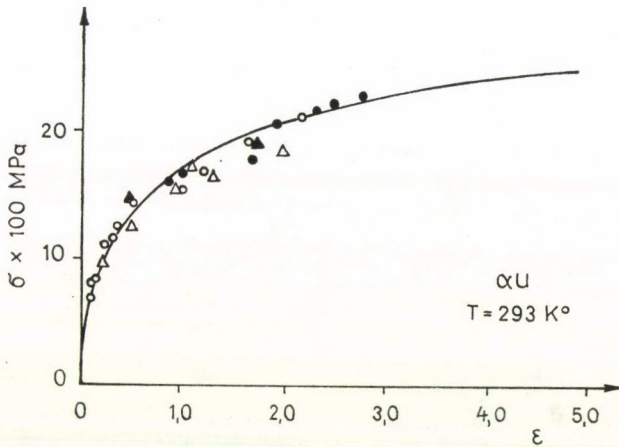
Cseppfolyós nitrogén hőmérsékleten alakított ólom $\sigma-\varepsilon$ összefüggését a 2. ábra mutatja. Látható, hogy ekkor az alakítás növelésével a feszültség monoton növekszik [6]. Hasonló alakítási keményedési görbét mutat a 3., 4. ábra polikristályos αU és



1. ábra. Feszültség deformáció összefüggés nagytisztaságú (99,999%) Pb $T=293\text{ K}$ -en történő összenyomásakor



2. ábra. $T = 77$ K-en összenyomott nagytisztaságú Pb feszültség deformáció görbéje



3. ábra. $T = 293$ K-en összenyomott αU feszültség deformáció görbéje

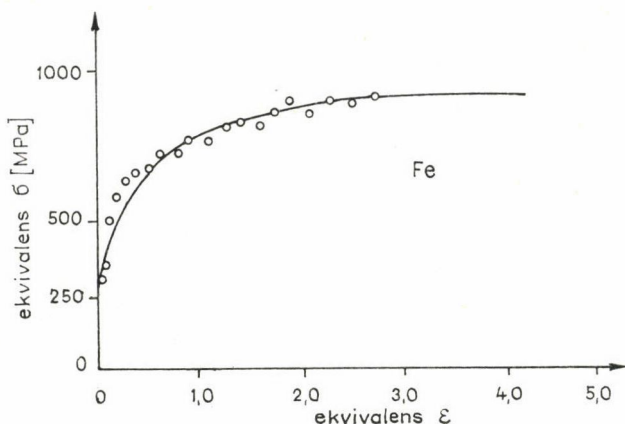
αFe esetén. A feszültség minden esetben a pillanatnyi keresztmetszetre vonatkozik és a deformáció mértékét az

$$\varepsilon = \ln \frac{h_0}{h}$$

mennyiség jellemzi, ahol h a pillanatnyi, h_0 a kezdeti keresztmetszet.

A 3., 4. ábrákon jól láthatjuk, hogy az egyensúlyi folyásfeszültség alacsony hőmérsékleti összenyomásnál jól megközelíthető. A $\sigma - \varepsilon$ görbék telítést mutatnak. Az alakítási keményedési görbe széles σ tartományban jól leírható a

$$\sigma = \sigma_s - M(\sigma_s - \sigma_y) \quad (1)$$



4. ábra. $T=293$ K-en összenyomott tiszta vas feszültség-deformáció görbéje

összefüggéssel, ahol σ_s az egyensúlyi folyásfeszültséget, σ_y a folyáshatárt jelenti. Az M tényezőre az alábbi két közelítést szokták alkalmazni:

$$M = \exp [-(N\varepsilon)^p], \quad (2)$$

illetve

$$M = \left[1 - \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_a} \right)^q \right], \quad (3)$$

ahol p , N , q , ε_a anyagi állandók. Mindkét függvény az $\varepsilon=0$ deformációnál az $M=1$, míg az $\varepsilon \rightarrow \infty$, illetve az $\varepsilon=\varepsilon_a$ esetben az $M=0$ értéket veszi fel.

A tapasztalat szerint az exponenciális közelítés adja a jobb közelítést. Ennek alapján a feszültség-deformáció összefüggés nagy alakváltozásokra a

$$\sigma = \sigma_s - \exp [-(N\varepsilon)^p](\sigma_s - \sigma_y) \quad (4)$$

kifejezéssel írható le. Ha (4)-be a $p=1$ értéket helyettesítjük be, akkor megkapjuk a Voce által javasolt

$$\sigma = \sigma_s - (\sigma_s - \sigma_y) \exp [-N\varepsilon]$$

összefüggést. Hockett és Sherby szerint azonban általában $p < 1$ (méréselt alakítási sebesség esetén $p=0,58$) [2].

Alacsony hőmérsékleten alakított egykristályok vizsgálatával Jaoul megállapította [7], hogy a felületcentrált köbös (fck) fémek feszültség-deformáció görbéjének II. szakaszában az alakítási keményedési sebesség ($d\tau/d\gamma$, τ nyírási feszültség, γ nyírási alakváltozás) állandó, és az értéke

$$\frac{d\tau}{d\gamma} = \frac{G}{200}, \quad (5)$$

ahol G a nyírási modulusz. Polikristályok esetén a II. szakaszban az alakítási keményedés sebességére a

$$\frac{d\sigma}{d\varepsilon} = \frac{E}{100} \quad (6)$$

értéket kapta, ahol E a Young modulusz [7].

Egy konkrét $\sigma-\varepsilon$ grafikon esetén a görbe deriváltját képezve, s ezt ábrázolva az ε függvényében, az így kapott görbén töréspont jelenik meg, amely az alakítási keményedés egyes szakaszait választja el. A görbék további jellegzetessége, hogy az alakítási keményedés sebessége növekvő deformációval csökken, s gyakran zérussá is válik. A

$$K = \frac{\sigma_s - \sigma_y}{E} \quad (7)$$

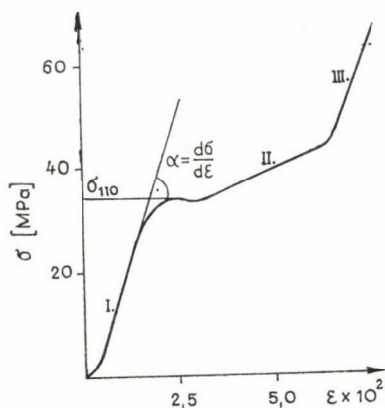
értékkel definiált mennyiséget alakítási keményedési kapacitásnak nevezzük, melynek adott anyagokra kapott különböző értékeit összehasonlítva a csúszási mechanizmusára következtethetünk. Az alakítási keményedési kapacitás pl. αU esetén 3–4-szer nagyobb, mint más anyagoknál. Ebből arra következtethetünk, hogy az αU -ban a csúszás bonyolult módon megy végbe és deformációs ikresedéssel is számolni kell [8].

3. Az összenyomási deformáció mikromechanizmusai

Ismeretes, hogy az alakváltozás a megfelelő kristálytani síkok egymáson történő elcsúszásával kapcsolatos. Az egykristályok deformációjának vizsgálatából kiderült, hogy ha a mintára alkalmazott feszültség nagysága egy adott csúszási rendszerben eléri a kritikus csúsztató feszültség értékét, akkor a csúszási rendszer aktiválódik. A csúszásvonal analízisből és a transzmissziós elektronmikroszkópos (TEM) vizsgálatokból ismeretes, hogy az alakítás kezdeti szakaszában a legkönnyebben aktiválható csúszási rendszerek működnek, egyszeres csúszások játszódnak le. Növelve a feszültséget az alakítás során keresztcsúszások is beindulnak. Kis alakítások esetén a deformálás módja nem befolyásolja lényegesen a kialakult diszlokáció szerkezetet, Néhány százalékos alakítás után már minden esetben megjelenik a jól ismert cellás diszlokációszerkezet [9].

3.1. Magas hőmérsékleti összenyomás mikromechanizmusai ($T > 0,6T_m$)

Alumínium egykristályon végzett [001] irányú összenyomáskor az 5. ábrán látható feszültség-deformáció görbét kapták [10]. A feszültség-deformáció görbe három szakaszra bontható. Az első szakaszban a folyásfeszültség a deformációval lineárisan változik. Az alakítási keményedési együttható nagy érték. Az I. szakaszban négy $\{111\}$ $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ csúszási rendszer aktiválódik, ennek megfelelő csúszásvonalak figyelhetők meg a metallográfiai képeken. TEM vizsgálatok azt mutatják, hogy a $\{001\}$, $\{110\}$, $\{111\}$ síkokban egyaránt találhatók cellafalak. Az átlagos cellaméret 5–10 μm .



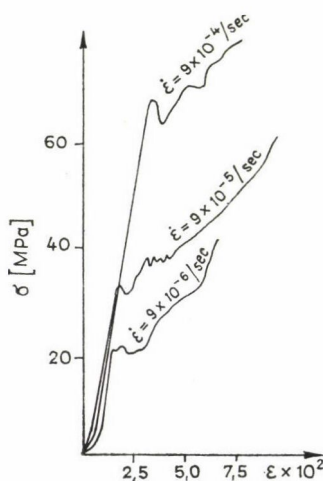
5. ábra. $T=495$ K-en összenyomott Al egykristály feszültség-deformáció görbéje

A második szakasz 1–2%-os alakítás után jelenik meg, s a $\sigma-\varepsilon$ görbén feszültségesés figyelhető meg. A feszültségcsökkenés kezdetéhez tartozó σ_{110} feszültségértéknél (5. ábra) jelenik meg az $\{110\}$ csúszási sáv, a csúszás megindul az $\{110\}$ síkokban is. Ezután sokkal kifejezettebbé válik az $\{110\}$ síkokkal párhuzamos cellafal szerkezet.

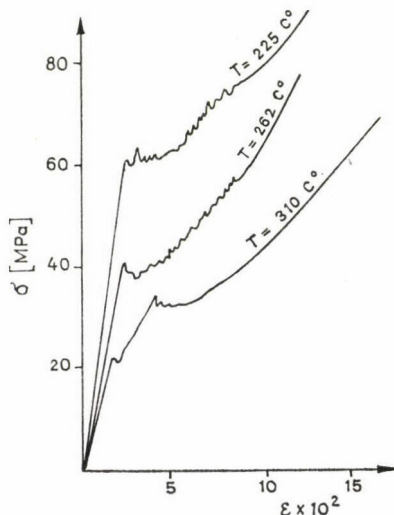
A deformáció harmadik szakaszában megszűnik a feszültség oszcilláció, a keményedés, az I. szakaszban tapasztalt alakítási keményedési sebességgel folytatódik. Mindkét csúszási rendszerben jelentőssé válik a csúszás, a primer cellaszerkezetben finomabb, az $\{110\}$ síkokkal párhuzamos cellafallal jellemezhető cellaszerkezet jelenik meg. Az átlagos cellaméret ezáltal 2–3 μm -re csökken.

A $\sigma-\varepsilon$ görbék alakja erősen függ a hőmérséklettől és a deformáció sebességétől. Az alakítási sebesség hatását láthatjuk a 6. ábrán, míg a 7. ábra a hőmérséklet hatását mutatja. A mérésekből meghatározott aktiválási energia az alumíniumban kialakuló keresztcsúszás aktiválási energiájával egyenlő ($Q \approx 28$ kcal/mól).

Az $\{110\}$ síkokon való csúszás az $\{111\}$ síkokon levő csavardiszlokációk kereszt-



6. ábra. $T=543$ K-en különböző deformációs sebességgel összenyomott Al egykristály feszültség-deformáció görbéi



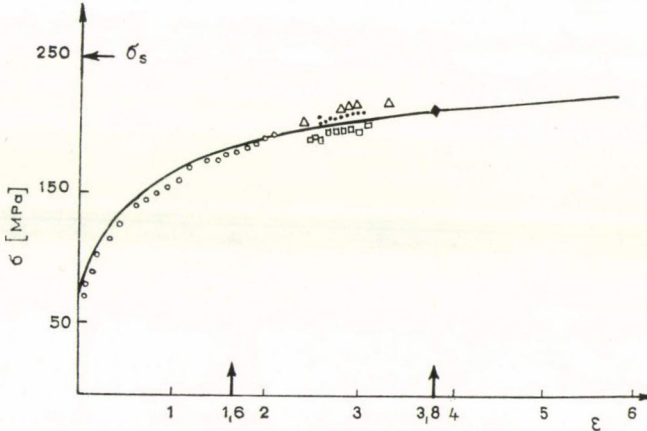
7. ábra. Az $\varepsilon=9 \times 10^{-5}/\text{sec}$ deformációs sebességgel különböző hőmérsékleteken összenyomott Al egykristály feszültség-deformáció görbéi

csúszásával értelmezhető. Ez azért lehetséges, mert a magas hőmérsékleten stabil rétegződési hiba stabilizálja az $\{110\}$ síkon történő csúszást. A rétegződési hiba kialakulása az $\{110\}$ síkon a magas hőmérsékleten stabil $\frac{a}{4} \langle 110 \rangle$ vektorral való elmozdulással kapcsolatos [10].

3.2. Az alacsony hőmérsékleti összenyomás mikromechanizmusai

Az alacsony homológ hőmérsékleteken végzett összenyomást TEM vizsgálatokkal kiegészítve megismerhetjük a deformációs állapothoz tartozó mikroszerkezetet. Az összenyomást megfelelő deformációk után megszakítva veszünk mintát a TEM vizsgálatokhoz. Ilyen módon a $\sigma-\varepsilon$ görbe mentén nyomon követhetjük a mikroszerkezet változását.

Armstrong és munkatársai 1100 Al mintákon végeztek párhuzamos összenyomási és TEM vizsgálatot [11]. A henger alakú minták nagy alakításakor megmunkálással biztosították a magasságmérő arány állandóságát. Az így kapott $\sigma-\varepsilon$ görbét a 8. ábra mutatja. Az alakítási keményedési görbe a (4) összefüggéssel jól leírható. A 8. ábrán nyilakkal bejelöltük azokat az állapotokat, melyeknél TEM vizsgálatot is végeztek. Az elektronmikroszkópos eredményekből megállapíthatjuk, hogy nagy alakításoknál a mikroszerkezet szabad diszlokációkat, diszlokáció kötegeket, cellákat és szubszemcséket egyaránt tartalmazhat. Az említett mikroszerkezeti jellemzők növekedő alakítással eltérő arányban találhatók a szerkezetben.



8. ábra. Szobahőmérsékleten összenyomott 1100 Al feszültség-deformáció görbéje

Az első mintavétel helyéből ($\varepsilon=1,6$) is láthatjuk, hogy ebben az állapotban már határozott szubszerkezetnek kell kialakulnia. A deformáció kezdeti szakaszában található szabad diszlokációk és kusza diszlokáció kötegek csak igen kis hányadát (kb. 5%) alkotják a szubszerkezetnek.

A diszlokáció cellákat a cellafalvastagság és a szomszédos cellák orientációja alapján azonosították. Szubszemcsék esetén koherensebb falakat és nagyobb orientációeltérést tapasztaltak a szubszemcsfal két oldalán. Megmérve a különböző mértékű alakításokhoz tartozó cellák és szubszemcsék számát, méretét és azok orientációviszonyait, nyomon követhetjük a mikroszerkezet fejlődését. Az említett mennyiségek értékeit az 1. táblázatban tüntettük fel.

1. TÁBLÁZAT

ε	σ	λ	θ	d	T	R	F	X	Y
1,6	186	1,8	5,8	0,75	0,16	4,87	0,5	0,16	0,79
3,8	214	1,1	8,0	0,50	0,04	1,82	0,5	0,62	1,14
Deformáció	Folyásfeszültség [MPa]	Szubszemcse méret [μm]	Orientáció eltérés (fok)	Cellaméret [μm]	Kusza diszl. által elfoglalt terület aránya	$\frac{Y}{X}$	Cella a szubszemcsében	Szubszemcse konc. [μm] ⁻²	Cella konc. [μm] ⁻²

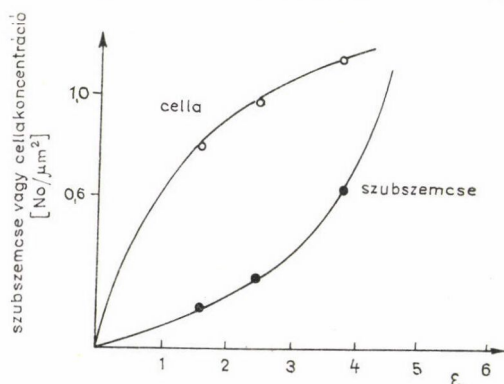
A cella és szubszemcse koncentráció számolására a

$$T + \lambda^2 X + d^2 (FY) = 1$$

egyenletet használtuk, ahol T a diszlokáció kötegek által elfoglalt területet, λ a szubszemcse méretét, d a cellaméretet jelenti. A szubszemcsék belsejében levő cellák arányát F -fel, míg a szubszemcse koncentrációt X -szel, a cella koncentrációt pedig Y -nal jelöltük.

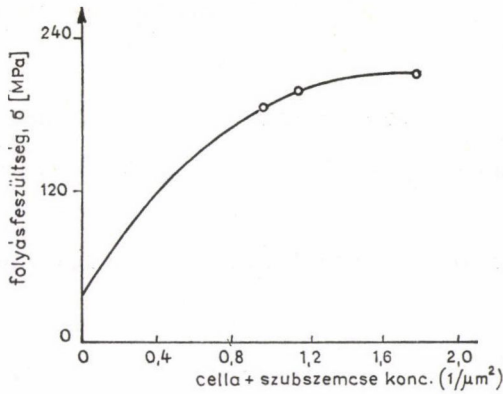
Az egyre növekvő alakítással kifejlődő szubszerkezet jellemzésére jól használható még a cellaszám és szubszemcseszám hányadosaként definiált $R = Y/X$ változó.

A mikroszerkezet változására az 1. táblázat felhasználásával a következőket mondhatjuk. Eltűnnek a kis alakításokra jellemző kusza diszlokáció kötegek. Növekvő alakítással a cellák és szubszemcsék koncentrációja nő, átlagos méretük viszont csökken. Az alakítás előrehaladtával a szubszemcsék orientációeltérése nő. A cellák és szubszemcsék koncentrációját a deformáció függvényében a 9. ábra mutatja. Megállapíthatjuk, hogy egyrészt a cellák koncentrációja mindig nagyobb mint a szubszemcséké, másrészt, növekvő deformációval a cellaképződés sebessége csökken, a szubszemcse képződés viszont fokozódik. A $\sigma - \varepsilon$ görbe telítési szakaszához egyensúlyi szubszerkezet tartozik. Ha teljessé válik



9. ábra. A cella és szubszemcse koncentráció változása a deformáció függvényében (1100 Al minta)

vekvő alakítással a cellák és szubszemcsék koncentrációja nő, átlagos méretük viszont csökken. Az alakítás előrehaladtával a szubszemcsék orientációeltérése nő. A cellák és szubszemcsék koncentrációját a deformáció függvényében a 9. ábra mutatja. Megállapíthatjuk, hogy egyrészt a cellák koncentrációja mindig nagyobb mint a szubszemcséké, másrészt, növekvő deformációval a cellaképződés sebessége csökken, a szubszemcse képződés viszont fokozódik. A $\sigma - \varepsilon$ görbe telítési szakaszához egyensúlyi szubszerkezet tartozik. Ha teljessé válik



10. ábra. A folyásfeszültség függése az együttes cella és szubszemcse koncentrációtól (1100 Al minta)

a szubszemcse és cellakonzentráció, méretük stabilá válik. A cellák és szubszemcsék együttes száma és a folyásfeszültség közötti kapcsolatot a 10. ábrán láthatjuk.

Az előző kvantitatív mikroszerkezeti ismereteket felhasználhatjuk a folyásfeszültség meghatározására is. Ha a folyásfeszültség a diszlokáció sűrűség négyzetgyökével arányosnak vehető [12] és adott diszlokációszerkezet esetén a

$$\sigma_f = k_0[k_1(A) + k_2(B) + k_3(C) + \dots]^{1/2} \quad (8)$$

formában írható, ahol k_1, k_2, \dots az egyes diszlokációsűrűség járulékok, akkor a TEM vizsgálatból ismert mikroszerkezeti egységek diszlokációsűrűségét meghatározva a folyásfeszültség számolható [11].

A szubszemcsék diszlokációsűrűsége a

$$k_1 = 2(2\lambda) \left(k'_1 \frac{\theta}{b} \right) X \quad (9)$$

összefüggéssel adható meg. Ugyanis a szubszemcsék kisszögű szemcsehatárok lévén, a falban levő diszlokációk száma $\left(k'_1 \frac{\theta}{b} \right)$. Az átlagos szubszemcse falhosszat (2λ), s a szubszemcsekoncentrációt ismerve adódik a diszlokáció sűrűség a (8) kifejezésben.

Hasonlóan kaphatjuk cellák esetén is a megfelelő diszlokációsűrűséget. Az Y cellakonzentráció, a $2d$ átlagos cellaméret, s a cellafalban levő diszlokációk számának $\left(k'_2 \frac{1}{d} \right)$ ismeretében a diszlokációsűrűséget a

$$k_2 = 2(2d) \left(k'_2 \frac{1}{d} \right) Y \quad (10)$$

összefüggés adja.

Kötegek esetén a kötegek által elfoglalt terület T , s az ezen levő diszlokációk száma ismeretében számolható a diszlokációsűrűség:

$$k_3 = k'_3 T. \quad (11)$$

A folyásfeszültségre tehát a (9), (10) és (11) felhasználásával a

$$\sigma_f = k_0[k_1''\theta\lambda X + k_2''Y + k_3''T]^{1/2} \quad (12)$$

kifejezés adódik. Az egyes tagok jellemzik a különböző mikroszerkezeti egységek szilárdságnövelő hatását [13]. Láthatjuk tehát, hogy θ , λ , X , Y és T mérésével számolható a folyásfeszültség. A számolás a mért σ értékkel jó egyezést mutatott [11].

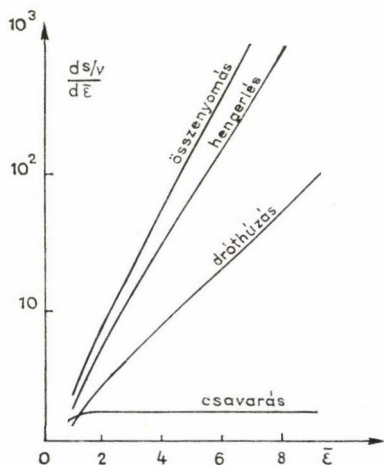
4. A mikroszerkezet változása nagy deformáció esetén

4.1. A szemcseszerkezet változása

A gyakorlatban legtöbbször polikristályos anyagokat alakítunk. Kis alakítások hatása a szemcsék (nagyszögű szemcsehatárokkal határolt tartományok) alakját lényegesen nem változtatja meg. Nagy deformációkat alkalmazva azonban a szemcsék a deformáció módjától függően jellegzetesen deformálódnak.

Alacsony hőmérsékleti deformáció esetén a szemcsehatár csúszástól eltekinthetünk, s az alakítás csupán a szemcsék deformációjában nyilvánul meg. A metallográfiai képekről szinte „leolvasható” a deformálás módja. Bármilyen módon alakítjuk is az anyagot, nagy deformációnál a szemcse egyik dimenziója lényegesen jobban változik, mint a másik két méret.

A szemcséken ugyanis ugyanolyan alakváltozás történik, mint a makroszkópos mintán. Ha pl. egyenletes szemcseszerkezetű polikristályos anyagot alakítunk dróthúzással, az $\bar{\epsilon} = 10$ deformáció elérésekor a hossz- és keresztmetszet aránya $2,2 \times 10^4$ értékkel lesz egyenlő. A szemcsék keskeny, elnyúlt ún. szálak képződményekké alakulnak. Ha a szemcse alakváltozását egyébként semmi nem akadályozza, egy 100 μm



11. ábra. A fajlagos szemcsfelület változásának sebessége az ekvivalens deformáció függvényében különböző deformálási módok esetén

átmérőjű szemcse 2,2 m hosszú, 67 nm széles elnyúlt szálla deformálódik. Az összenyomás korong alakú szemcséket eredményez. Ha az előbb említett nagy alakítást összenyomással hajtjuk végre, úgy egy szemcséből 4,5 nm vastag korongot kapunk. Ilyen méretű ún. mikroszemcséket még nem figyeltek meg, mert megújulási és rekristallizációs folyamatok is szerepet játszanak a szemcseméret kialakulásában [14]. Egy kezdetben egyenletes szemcseszerkezetű anyag egyirányú alakításakor a térfogategységre jutó szemcsehatárfelület (S/V) megnő. Ha a szemcsehatár energia az alakítás során nem változik, úgy az S/V növekedésével energiaadszorpció jár együtt. Ez az energiaadszorpció hozzájárul az anyag tárolt energiájához, s a folyásfeszültség kialakításában is szerepet játszik [14].

A szemcsehatár felület növekedése a deformáció módjának függvénye (11. ábra) [15]. Az S/V növekedési sebessége összenyomással nő a legjobban, míg a csavarás nem növeli lényege-

sen az S/V -t még a nagy deformációk tartományában sem. A szemcsfelület növekedéséből adódó energijárulék csak kezdeti aprószemcsés anyag esetén jelentős, ha azon nagy deformációt alkalmazunk. Pl. egy $10\text{ }\mu\text{m}$ élhosszú kocka alakú réz szemcse $\bar{\epsilon}=5$ valódi deformációjakor a szemcsehatár felületi energiára $0,7\text{ J/m}^2$ értéket véve $\sim 9,6\text{ J/cm}^3$ tároltenergia növekedéssel kell számolnunk [15].

A fentiekből is láthatjuk, hogy nagy deformációk esetén az alakítás módjától függő, jellegzetes, texturás szemcseszerkezet alakul ki.

4.1.1. Inhomogenitások a deformált szerkezetben

Az optikai mikroszkópos felvételeken a deformáció módjának megfelelő átlagos szemcsealakot láthatjuk, de számos morfológiai hatás azt mutatja, hogy különböző típusú inhomogenitások is megjelennek az alakítás során. A heterogenitások két csoportba oszthatók. Az egyik csoport a szemcséken belül megjelenő heterogenitásokat tartalmazza, a másikba pedig a több szemcsét is érintő heterogenitásokat soroljuk [15].

Optikai mikroszkópos képeken gyakran láthatunk a csúszással kapcsolatos csúszási sávokat. Nagy rétegződési hiba energiájú (RHE) anyagok deformálásakor a csúszás ezekbe a sávokba koncentrálódik [16].

Kis RHE anyagokban viszont már mérsékelt alakítás esetén is kialakulnak ún. mikroikerkamellák, illetve ezekből képződött mikroikercsoportok. Az alakítás növelésével ezek sűrűsége nő, s egyenletes iker eloszlást figyelhetünk meg már $\bar{\epsilon}=1$ deformáció esetén. Kialakulásukat a RHE, az alakítás hőmérséklete jelentősen befolyásolja.

Több szemcsére kiterjedő heterogenitás a csúszási sáv (intense shear band). Kialakulása azzal kapcsolatos, hogy az alakítás a minta egész térfogatában nem egyenletes. Ezekben a csúszási sávokban a szemcsék jobban deformálódnak. Főleg hengerléskor képződnek, tengelyszimmetrikus alakítás során kevésbé valószínű a kialakulásuk.

4.2. A szubszerkezet kialakulása

A TEM vizsgálat erőteljes fejlődése tette lehetővé az alakítás során kialakult szubszerkezet változásának követését. A vizsgálatok jelentős része kvalitatív, mert főleg a nagy deformációk tartományában a diszlokációsűrűség olyan nagy, amely direkt módon nem mérhető. Kiszögű szemcsehatárok esetén, mint láttuk, számolható (3.2. fejezet).

Míg a szemcseszerkezet kialakításában a deformáció módjának jelentős szerep jut, a szubszerkezet változására kisebb hatással van. A szubszerkezet változását a deformáció *mértéke* befolyásolja jelentősen.

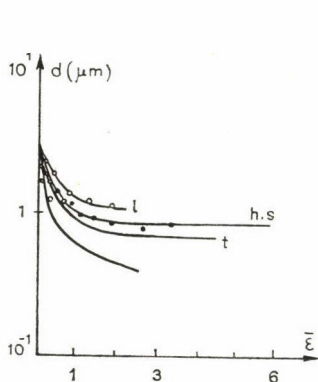
Az előző fejezetekből is kitűnt, hogy már néhány százalékos alakítás után minden szemcsében megfigyelhetjük a jellegzetes cellás szerkezetet. A háromdimenziós összefüggő cellaszerkezet diszlokációkban szegény tartományokat határol. A diszlokációsűrűség a cellafalakban általában háromszor-ötször nagyobb, mint a cella belsejében. A kezdetben bizonyos kristálytani síkokban kialakult falszerkezet a deformáció nö-

vekedésével mindhárom dimenzióra kiterjed. A cellaméret kb. $1\text{ }\mu\text{m}$ körüli átlagértéssel adható meg, mely az alakítás növelésével gyorsan csökken. Kis RHE fémekben a cellák hasonló módon, de nagyobb deformációk esetén alakulnak ki.

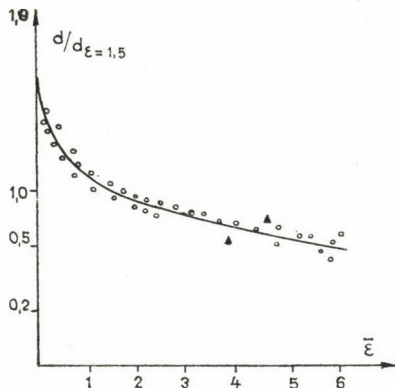
Növekedő deformációval a cellán belül található kevés diszlokáció is eltűnik, a cellafalak kuszasága csökken, a cellafalak élesednek, szubszemcsék jelennek meg.

A szubszemcsék kialakulását polygonizációs folyamatnak nevezzük. A cella és szubszemcse mint két mikroszerkezeti egység együttes jelenléte jellemzi a deformációt. Kezdetben a cellák száma sokkal több, mint a szubszemcséké, de a növekvő alakítás a szubszemcse kialakulásának kedvez. A cella-szubszemcse átmenet más deformációs értéknél következik be attól függően, hogy milyen tisztaságú és anyagi minőségű anyagot deformálunk.

A kis alakítások során kialakult cellák *alakja* és *mérete* változik, ha növeljük a deformációt. A cellák alakja a külső deformációra jellemzővé válik, pl. összenyomás esetén korong alakú cellákat figyelhetünk meg. A cellák dimenzióinak változása a makroszkópos deformációval nem homológ módon változik. Egy egyenletes méretű cellákból felépülő szerkezet három dimenzióban eltérő módon változik. Hengerelt Al cellaszerkezetének változása látható a deformáció függvényében a 12. ábrán.



12. ábra. Az átlagos cellaméret változása a deformáció függvényében hengerelt minta három merőleges metszetében, (d_t transzverzális, d_l longitudinális, d_{hs} a hengerlési síkban meghatározott átlagos méret)



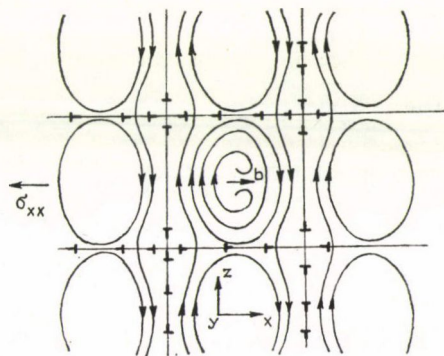
13. ábra. A relatív cellaméret változása a deformáció függvényében. A görbe meredekségének változása a diszlokáció sokszorozódás, illetve annihiláció folyamataira jellemző. Az $\bar{\epsilon} = 1,5$ deformációhoz $d_{\epsilon=1,5} = 1,5\text{ }\mu\text{m}$ cellamérettel normálva

A hengerlési síkban, transzverzális és longitudinális metszetben a cellaméretváltozás sebessége eltérő ($d_l > d_{hs} > d_t$). A cellaméret csökkenése kezdetben erőteljesebb, mint az a makroszkópos alakváltozásból következne. A cellák aprózódása diszlokáció sokszorozódással kapcsolatos. További alakítás hatására a cellaméretváltozás sebessége csökken mindhárom dimenzióban. Ebben a szakaszban már a diszlokációeltűnés (annihilálódás) számottevővé válik. A már meglévő cellafalakban szűnhetnek meg a diszlokációk, de cellahatár csúszással is csökkenhet a számuk. A diszlokáció sokszorozódás és megszűnés egyensúlya határozza meg végül az egyensúlyi folyáshoz tar-

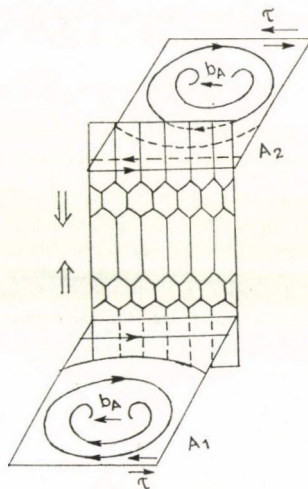
tozó átlagos cella és szubszemcse méretet. A fajlagos cellafelület változik tehát az alakítás során, ennek változásából következtethetünk arra, milyen deformációtól válik dominánssá az egyik, illetve másik folyamat (13. ábra). Hengerléskor a longitudinális metszet kitüntetetté válik azáltal, hogy ebben dominál az új falak keletkezése. Az annihiláció és cellafalcsúszás viszont a másik két metszetben valószínűbben lejátszódó folyamat.

Láthatjuk tehát, hogy minden deformációs mód esetén megadhatunk egy jellemző szubszerkezeti méretet, mely az alakítás során karakterisztikus az alakítás módjára. Az összenyomási deformációt a korong alakú cellák vastagságának változásával jellemezhetjük. A deformáció módjára jellemző cellaméret változása az alakítás során felvilágosítást adhat a diszlokáció sokszorozódás, illetve annihiláció arányáról. A diszlokáció megszűnést általában a diszlokációk termikusan aktivált mozgásával hozzák kapcsolatba. Alacsony hőmérsékleten azonban a termikus mozgás gátolt, mégis tapasztalunk diszlokációeltűnést. Az alacsony hőmérsékleti diszlokáció annihilációval kapcsolatos jelenség az alacsony hőmérsékleti dinamikus megújulás.

A diszlokáció megszűnése a diszlokációk kúszó, csúszó és keresztcsúszó mozgásával kapcsolatos. Számos modell létezik, mely a dinamikus megújulás mechanizmusait részletezi [16]. Egy, a diszlokáció megszűnéssel kapcsolatos modellel foglalkozunk a következőkben. Az egy síkban levő egyenletes szubszemcse szerkezet szemcséiben levő diszlokáció forrás a szubszemcsehatár felé diszlokációkat bocsát ki (14. ábra). A kibocsátott diszlokációk a szubszemcse határt ellentétes előjelű Burgers vektorral közelítik meg, tehát vonzzák egymást. Így lehetőség nyílik egyes diszlokációs szakaszok



14. ábra. Modell az egy síkban levő szubszemcsék belsejében képződött ellentétes előjelű diszlokációk eltűnésére



15. ábra. Modell diszlokáció megsemmisülésre, ha a diszlokációforrások egymással párhuzamos síkokban vannak. Az ellenkező előjelű diszlokációk a párhuzamos síkokat összekötő szubszemcsehatáron keresztül jutva megsemmisülhetnek meg

megszűnésére [17]. A 15. ábrán egymással párhuzamos síkokban fekvő szubszemcsék alkotják a szubszerkezetet. A diszlokáció megszűnése akkor is lehetővé válik, ha az egyik síkból keresztcsúszhatnak bizonyos diszlokációs szakaszok a másikba, ahol az ellentétes előjelű Burgers-vektor miatt szintén megsemmisülnek [18]. Alacsony hőmérsékleten végzett deformáció során az előbbi mechanizmussal szűnhetnek meg diszlokációk.

5. Összefoglalás

A dolgozatban az összenyomási deformáció jellegzetességeit tekintettük át. Az alacsony hőmérsékleti összenyomással a nagy deformációk tartományában is vizsgálhatjuk az alakítási keményedést. A $\sigma-\varepsilon$ görbe telítési szakaszának vizsgálata is mód nyílik összenyomás segítségével. A $\sigma-\varepsilon$ görbék matematikai analízise mellett foglalkoztunk a magas- és alacsony hőmérsékleti összenyomás mikromechanizmusával. Végigkövettük a szemcseszerkezet és a szubszerkezet változását a nagy deformációk tartományában.

IRODALOM

1. C. M. Young, L. J. Anderson and O. D. Sherby, *Met. Trans.* 5A, 519, 1974.
2. J. E. Hockett and O. D. Sherby, *J. Mech. Phys. Solids*, 23, 87, 1975.
3. Kovács I., *Magyar Fizikai Folyóirat*, 28, 3, 1980.
4. S. Tóth L., *Magyar Fizikai Folyóirat*, 28, 23, 1980.
5. Rajkovits Zs., *Magyar Fizikai Folyóirat*, 28, 15, 1980.
6. Csete István, *Szakedolgozat*, ELTE, TTK, 1979.
7. B. Jaoul, *J. Mech. Phys. Solids*, 5, 95, 1957.
8. J. S. Daniel, B. Lesage and R. Lacombe, *Acta Met.* 19, 163, 1971.
9. G. Seviliano, P. van Houtte and E. Aernoudt, *Prog. Mat. Sci.* 25, 69, 1980.
10. R. Le Hazif and Jean-Paul Poirer, *Acta Met.* 23, 865, 1975.
11. P. E. Armstrong, J. E. Hockett and O. D. Sherby, *J. Mech. Phys. Solids*, 30, 37, 1982.
12. G. I. Taylor, *Proc. Roy. Soc.*, A145, 362, 1934.
13. Rajkovits Zs., *Magyar Fizikai Folyóirat*, 29, 254, 1981.
14. J. Nutting, *Electron Microscopy and Structure of Materials*, ed. R. G. Thomas et al. University of California Press, Berkeley, 1972. p. 617.
15. A. S. Malin and M. Hatherly, *Metal Sci.* 13, 463, 1979.
16. H. J. McQueen, *Met. Trans.*, 8A, 807, 1977.
17. V. K. Lindroos, *Acta Polytech. Scan.* 76, 1, 1968.
18. V. K. Lindroos and H. M. Miekko-oja, *Phil. Mag.* 30, 115, 1974.

6. POLIKRISTÁLYOK NAGY ALAKVÁLTOZÁSAI

S. TÓTH LÁSZLÓ

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOM

1. Bevezetés	443
2. Ekvivalens feszültség és ekvivalens deformáció	444
3. Feszültség-deformáció görbék	446
4. A deformált állapot struktúrája	451
5. A szubszerkezet fejlődését leíró modellek	454
6. A nagy deformációk esetén fellépő jellegzetes effektusok	457
7. Textúrák	458
8. Összefoglalás	460
9. Irodalom	460

1. Bevezetés

A gyakorlatban felhasználásra kerülő fémek rendszerint igen nagyszámú egykristályból (szemcsékből) épülnek fel, azaz polikristályos szerkezetűek. A különböző szerkezeti anyagok előállítása során legtöbbször nagymértékű deformációval hozzák létre a kívánt formát. Ez történhet a fém olvadáspontjához képest alacsony vagy magas hőmérsékleten. Ennek megfelelően sokféle hidegalakítási módszer (pl. dróthúzás, sajtolás), ill. melegalakítási eljárás ismeretes (pl. hengerlés, kovácsolás). *Lange* 1971-ben több mint 200 féle hidegalakítási eljárást ismertetett [1], amelyek nagy része szobahőmérsékleten is végrehajtható. Az I. táblázatban összefoglaljuk a leglényegesebb alakítási eljárásokat és azok jellemzőit.

Az alakítás mértékének növekedésével a kezdeti szemcseszerkezet orientáció-eloszlása erősen megváltozhat. Ha a kiindulási anyag véletlenszerűen orientált szemcsékből állt, az alakítás során egy vagy több maximummal rendelkező orientáció-eloszlási-függvény alakulhat ki. Ez az eredmény az egyedi szemcséknek az alakítás hatására bekövetkező rotációjának a következménye, amelyet textúrá sodásnak nevezünk. A textúra mértéke szerint az anyag erősen anizotrop lehet, amelynek egyik következménye például a képlékenységi összefüggések jelentős megváltozása.

Alapvető probléma a különböző deformálási módszerek feszültség-deformáció adatainak az összehasonlítása. Ezt a plasztikus munkák egyenlősége alapján az ún. ekvivalens feszültség-ekvivalens deformáció összefüggések megadásával próbálják elérni.

Egy másik fontos kérdés, hogy miképpen következtethetünk az egykristályokon mért adatokból a polikristályos viselkedésre. Erre vonatkozóan kétféle alapvető elmélet ismeretes; a Taylor- és a Sachs-modell [2, 3]. A Taylor-modell alapfeltevése, hogy a polikristály egyedi szemcséi pontosan olyan alakváltozást szenvednek, mint az egész próbatest, a Sachs-modell szerint pedig az egyes szemcsékre gyakorolt feszült-

I. TÁBLÁZAT

A leglényegesebb deformálási módszerek és azok jellemzői

Módszer	A deformálás módja	Az elérhető max. deformáció	Deformáció-sebesség (s^{-1})	Megjegyzés
Nyújtás	egytengelyű megnyúlás	0,2—0,5 (a nyaknál ~ 1)	10^{-5} — 10^1 (spec. technikával: 10^2)	$\dot{\epsilon}$ csökken (a nyaknál nő)
Kompresszió	tengelyszimmetrikus összenyomás	~ 1 (spec. technikával: 2—3)	10^{-3} — 10^0 (spec. technikával: 10^2)	— $\dot{\epsilon}$ nő — súrlódás — heterogén def.
Csavarás	nyírás	vékonyfalú csőnél: 0,5—1 tömör rúdnl: 2—8	10^{-4} — 10^{-2}	— kismértékű dimenzió változás — $\dot{\epsilon}$ konstans — (heterogén def.)
Hidraulikus terhelés	kéttengelyű nyújtás	0,4—0,8	10^{-3} — 10^{-2}	sík anyagokon

ség-állapot olyan mint a próbatestre kívülről kifejtett makroszkopikus feszültség, és az egyes szemcsék egymástól függetlenül egykristály módjára deformálódnak. A két elmélet sok helyen lényegesen különböző eredményekre vezet. Legújában több olyan elgondolás született, amely a két elmélet közötti kompromisszumon alapul [4—6].

A nagy teljesítményű számítógépek alkalmazásával ma már arra is lehetőség van, hogy konkrét szemcseszerkezetből kiindulva elemi deformációs lépések sorozatával feszültség-deformáció görbét készítsünk. Az így szerkesztett görbét a kísérleti eredményekkel összehasonlítva a feltett polikristályos alakváltozási mechanizmus helyességére következtethetünk. A nagy deformációk esetén azonban olyan mikroszerkezeti mechanizmusok lépnek fel (pl. cellák, szubszemcsék alakulnak ki), amelyeket az elméletek jelenleg nem tudnak figyelembe venni.

Jelen dolgozat célja az, hogy rövid áttekintést adjon a polikristályos anyagok nagy alakváltozásairól szerzett elméleti és kísérleti eredményekről, a mikroszerkezeti mechanizmusokról.

2. Ekvivalens feszültség és ekvivalens deformáció

A különböző deformálási módok feszültség-deformáció görbéi az ekvivalens feszültség és ekvivalens deformáció alapján hasonlíthatók egymással össze. Az ekvivalens feszültség ($\bar{\sigma}$) megállapítása kétféleképpen lehetséges. Az egyik lehetőség a folyásfeltétel felhasználása.

Megállapodás szerint az ekvivalens feszültség legyen olyan, hogy tiszta nyújtásra $\bar{\sigma} = \sigma$. Ez a feltétel a Mises-féle folyási törvény [7] alapján a következő definícióra vezet:

$$\bar{\sigma} = \left(\frac{3}{2} \sigma'_{ij} \sigma'_{ij} \right)^{1/2}, \quad (1)$$

ahol $\sigma'_{ij} = \sigma_{ij} - \frac{1}{3} \sigma_{ii} \delta_{ij}$ a feszültség-deviátor tenzort jelöli. Például véletlen eloszlású szemcse orientációjú próbatest egymásra merőleges egyidejű csavarása és nyújtása esetén az (1) összefüggés alapján az ekvivalens feszültség:

$$\bar{\sigma} = (\sigma^2 + 3\tau^2)^{1/2}, \quad (2)$$

ahol σ a húzó és τ a csavarófeszültséget jelöli. A (2) összefüggés alapján a tiszta csavarás és a tiszta nyújtás folyáshatára (σ_f , ill. τ_f) között a

$$\sigma_f = \sqrt{3} \tau_f \quad (3)$$

összefüggés áll fenn.

Közismert, hogy az irodalomban hol a Mises, hol pedig a Tresca-feltételt használják az ekvivalens feszültség meghatározásához. A Tresca-feltétel felhasználásával [8] a

$$\sigma_f = 2\tau_f \quad (4)$$

összefüggésre jutunk, amely szerint τ_f csavarófeszültség $2\tau_f$ nyújtófeszültséggel egyenértékű.

Textúrák polikristályok esetében rendszerint nem ismerjük a folyásfeltételt, mert az izotrop esetre alkalmazott Mises- vagy Tresca-féle feltételek az anizotrópia miatt nem használhatóak. Ebben az esetben a következőképpen járhatunk el [9]. Először is számítógépes eljárással előállítjuk az anyag polikristályos modelljét, majd a feszültségállapot ismeretében minden szemcsében külön-külön kiszámoljuk a csúszósíkokban, a csúszási irányokban működő feszültségeket („resolved shear stresses”). Ez a szemcsénkénti 12 csúszási rendszernek megfelelően 12 csúsztató feszültséget jelent. Ezután kiválasztjuk ebből az 5 legnagyobb csúsztató feszültséget és ezek átlagát tekintjük az adott szemcsében érvényes kritikus csúsztató feszültségnek. Természetesen ekkor a külső feszültség éppen akkora, amely a plasztikus folyás megindulásához kell, ezért a szemcsénkénti átlagok esetében a kritikus csúsztató feszültséget kapjuk (τ_c). Megjegyezzük, hogy azért kell az 5 legnagyobb csúsztató feszültség átlagát képeznünk, mert 5 csúszási rendszer egyidejű működése szükséges ahhoz, hogy a polikristály adott szemcséjén bármilyen, a szomszédos szemcsék által meghatározott alakváltozás megvalósulhasson. Végül a makroszkopikus plasztikus folyáshatárt akkor kapjuk, ha a polikristályos modell valamennyi szemcséjének az így kapott kritikus csúsztató feszültségét átlagoljuk. Ezzel a módszerrel bármilyen textúra esetében előállítható mind a folyásfüggvény, mind pedig az ekvivalens feszültség. Például az $\langle 100 \rangle$ textúra esetében azt kapjuk, hogy

$$\sigma_f = 1,05 \tau_f,$$

azaz a nyújtási és a csavarási folyáshatár alig különbözik egymástól [10]. A teljesen véletlenszerű szemcseorientációk esetére, azaz a textúramentes anyagra pedig a

$$\sigma_f = 1,84 \tau_f \quad (5)$$

összefüggés érvényes [9], amely éppen a Mises- ill. a Tresca-féle ekvivalens feszültségek ((3) és (4) összefüggések) közé eső érték.

Az ekvivalens deformáció meghatározása a plasztikus munkák egyenlőségén alapul. Definíció szerint az ekvivalens deformáció ($\bar{\epsilon}$) legyen olyan, hogy $d\bar{\epsilon}$ ekviva-

lens deformáció növekmény során az ekvivalens feszültséggel számított plasztikus munka ($\bar{\sigma} d\bar{\epsilon}$) legyen egyenlő az elemi plasztikus munkák összegével, azaz

$$\bar{\sigma} d\bar{\epsilon} = \sigma_{ij} d\epsilon_{ij}. \quad (6)$$

Kimutatható [11], hogy ha az általános folyási törvény érvényes, akkor ez a feltétel a

$$d\bar{\epsilon} = \left(\frac{2}{3} d\epsilon_{ij} d\epsilon_{ij} \right)^{1/2} \quad (7)$$

definícióval kielégíthető. A (7) kifejezéssel definiált ekvivalens deformáció alapján a (6) összefüggés (és egyben az általános folyási törvény) érvényessége egyidejű csavarás és nyújtás esetén kísérletileg is bizonyítást nyert [11]. Ebben az esetben az ekvivalens deformáció az $\epsilon - \gamma_t/\sqrt{3}$ görbe ívhosszával egyezik meg, ahol ϵ a csavarás során fellépő nyúlási, γ_t pedig a csavarási deformációt jelöli.

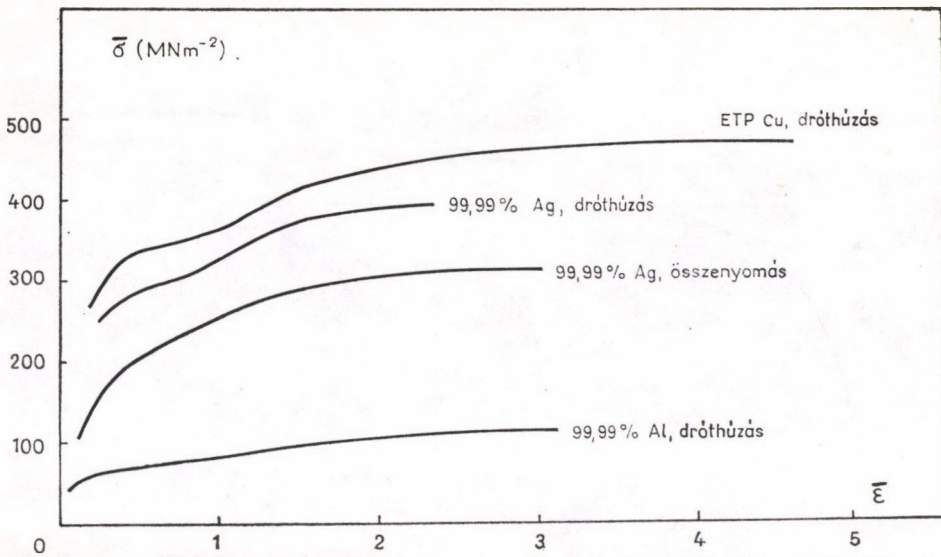
Az (1) és (7) összefüggések alapján a különböző deformálási módok feszültség-deformáció görbéi egy közös (ekvivalens feszültség-ekvivalens deformáció) görbébe transzformálhatók.

Megjegyezzük, hogy az (1) és (7) definíciók fenomenologikus meggondolásokon alapulnak, és nem veszik figyelembe az alakváltozás krisztallográfiai tulajdonságait. Mindenesetre a véletlenszerűen orientált szemcsékből felépülő polikristályra a krisztallográfiai csúszások alapján számítógéppel felállított folyási függvény [9] hasonlósága a rugalmas kontinuumra definiált Mises-féle folyásfeltételhez azt mutatja, hogy a véletlenszerű szemcseszerkezet esetében az (1) és (7) összefüggések az ekvivalens feszültség és ekvivalens deformáció meghatározására jól használhatók kell, hogy legyenek. Nem érvényesek azonban a textúrák anyagok esetében, illetve a kezdetben textúra-mentes, de nagy mértékben deformált anyagokra sem. Ez utóbbi esetben ugyanis szintén textúra jön létre. Ennek oka a folyási feltétel (sok esetben nagyon lényeges mértékű) megváltozása. Ez komoly problémát vet fel a különböző deformálási módok feszültség-deformáció görbéinek összehasonlításánál, mivel a deformáció módjától erősen függ a kifejlődő textúra jellege.

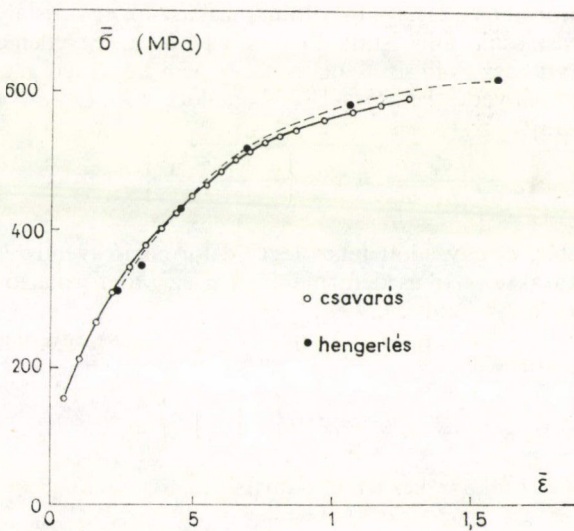
A különböző textúrák folyásfüggvényének meghatározására jól járható utat mutat a [9, 10] dolgozatokban leírt számítógépes eljárás. Az alakváltozást jellemző deformáció paraméter definíciójára pedig legcélszerűbbnek egy olyan eljárás mutatkozik, amely a plasztikus munkák egyenlősége alapján az összes krisztallográfiai csúszás meghatározásával ad meg összefüggést a különböző deformált textúrák polikristályos anyagok deformációi között.

3. Feszültség-deformáció görbék

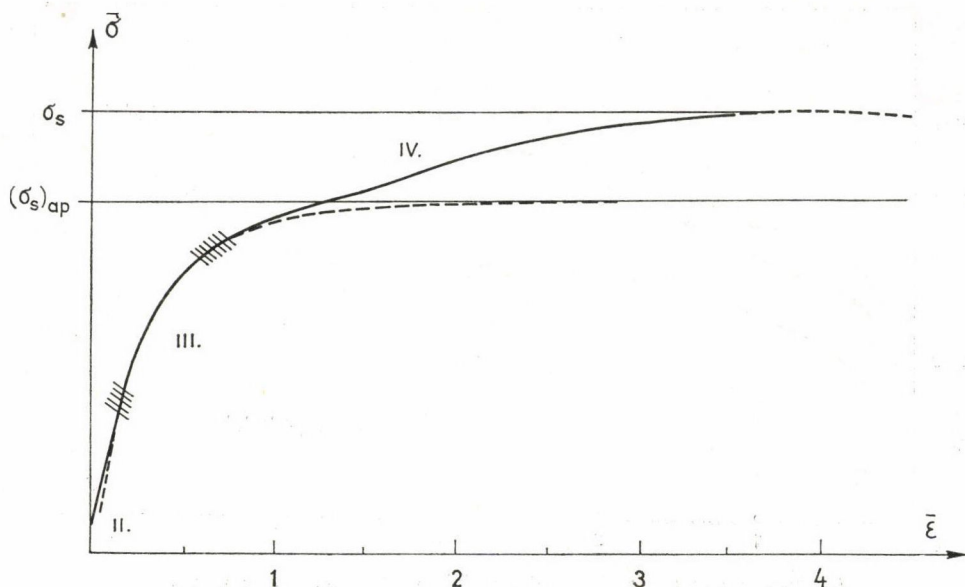
Jellegetes dróthúzási, összenyomási, csavarási és hengerlési feszültség-deformáció görbéket mutat az 1. és a 2. ábra. Az 1. ábra szerint az alakítási keményedés sebessége nagy deformációknál ($\bar{\epsilon} > 2$) zérushoz tart. A 2. ábra érdekessége, hogy az ekvivalens feszültséget és deformációt csavarásnál a Tresca, hengerlésnél pedig a Mises-feltétel alapján határozták meg és így kaptak jó egyezést a kétféle deformáció között.



1. ábra. Jellemző feszültség-deformáció görbék tengelyszimmetrikus deformáció (dróthúzás és összenyomás) esetén [12]



2. ábra. Ekvivalens deformáció-ekvivalens feszültség görbék 70/30 sárgarézre csavarás és hengerlés esetén. Az ekvivalens feszültséget csavarásra a Tresca-feltétellel, hengerlésre pedig a Mises-feltétellel határozták meg [12]



3. ábra. Egyfázisú fémek és ötvözetek tipikus keményedési görbéje sematikusán

Általában a polikristályok alakítási keményedési görbéin három lényeges szakasz figyelhető meg (3. ábra), amelyeket „II, III, és IV. szakasz” jelölésekkel neveznek meg. A II. (lineáris) és a III. (parabolikus) szakasz az egykristályokéhoz hasonló menetű, a IV. szakasz csak polikristályokon észlelhető. Az egyetlen csúszási rendszer működését leíró I. szakasz polikristályok esetében nem figyelhető meg.

Az alakítási keményedés leírására 1948-ban Voce a következő empirikus összefüggést adta meg [13]:

$$\frac{\sigma_s - \sigma}{\sigma_s - \sigma_0} = \exp \left\{ - \frac{(-\varepsilon - \varepsilon_1)}{\varepsilon_c} \right\}, \quad (8)$$

ahol σ_0 a folyáshatár, ε_1 egy adott tetszőleges deformáció (rendszerint nulla), ε_c az anyag egy adott karakterisztikus deformációja, σ az ε deformáció esetén a folyási feszültség és σ_s a telítési feszültség.

Tiszta fém anyagok csavarásának esetére Kovács a (8) egyenlet egy módosított formáját vezette be [14]:

$$\tau = \tau_s - A \exp \left\{ - \left(\frac{\gamma}{\gamma_4} \right)^{1/2} \right\}, \quad (9)$$

ahol $\gamma_4 \approx 0,42$ a IV. szakasz kezdetéhez tartozó deformáció, τ pedig a telítési feszültség.

A III. és IV. szakasz paraméterei között kapcsolat állítható fel annak alapján, hogy a feszültség és deriváltja a deformáció függvényében folytonosan megy át a III. szakaszból a IV-be, azaz

$$\tau(\gamma_4)|_{III.} = \tau(\gamma_4)|_{IV.},$$

illetve

$$\left(\frac{d\tau}{d\gamma} \right)_{\gamma_4|_{III.}} = \left(\frac{d\tau}{d\gamma} \right)_{\gamma_4|_{IV.}}$$

Ezen összefüggéseket felhasználva a III. parabolikus keményedési szakasz, illetve a IV., telítésbe tartó szakasz ((9) összefüggés) alapján a negyedik szakasz kezdetéhez tartozó feszültség:

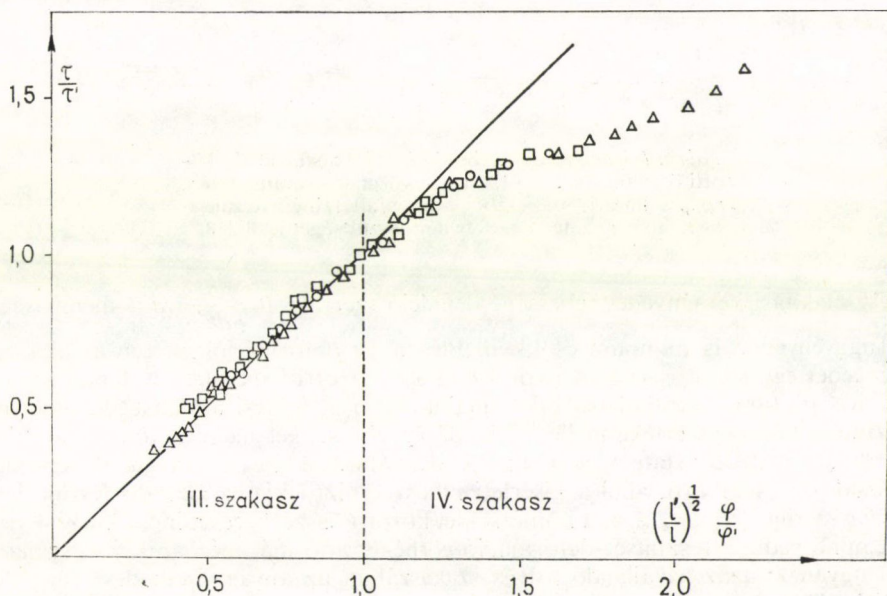
$$\tau_4 = \chi_3 \gamma_4^{1/2} + \tau_{30},$$

illetve a telítési feszültség:

$$\tau_s = 2\chi_3 \gamma_4^{1/2} + \tau_{30},$$

ahol χ_3 az alakítási keményedés sebessége; $\chi_3 = \frac{d\tau}{d\gamma}$ és τ_{30} a III. szakaszhoz tartozó állandó [14].

Csavarási deformáció esetén már a IV. szakasz kezdetétől jelentős a deformációs textúra hatása, amely a makroszkopikus nyírási rugalmassági modulusznak a plasztikus deformációtól való függését eredményezi. Ezt szemlélteti a 4. ábra, amely a Cu—1% Co ötvözet csavarásánál a plasztikus deformáció függvényében a IV. szakasz kezdetére vonatkoztatott relatív rugalmas elcsavarási szögek és a relatív feszültségek közötti kapcsolatot mutatja [11]. A kifejlődő textúra hatására a IV. szakasz kezdetéhez tartozó ~40% nyírási deformáció fölött a két mennyiség közötti lineáris kapcsolat megszűnik.

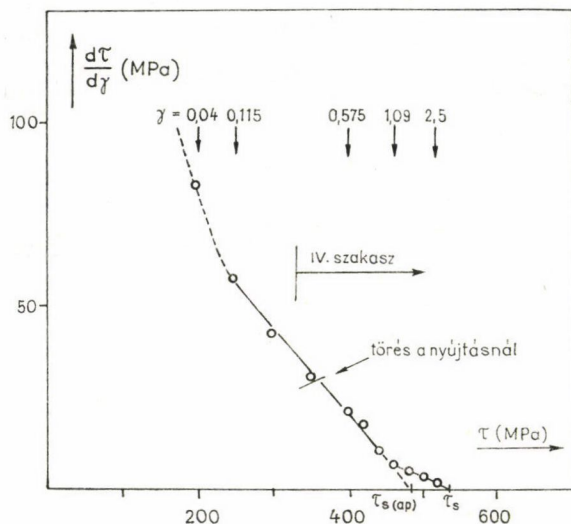


4. ábra. A IV. szakasz kezdetére vonatkoztatott relatív csavarási feszültség a relatív rugalmas elcsavarodási szög függvényében Cu—1% Co csavarása esetén. φ' és τ' a 40% nyírási deformációhoz tartozó rugalmas csavarási szög, illetve csavarási feszültség, l és l' a pillanatnyi, illetve a 40% nyíráshoz tartozó csavarási hossz [11].

Hockett és Sherby a (8) egyenletben szereplő exponenciálisban a (9) egyenlethez hasonlóan a deformáció hatványával módosította a Voce-egyenletet [15]:

$$\sigma = \sigma_s - (\sigma_s - \sigma_0) \exp \{-N\varepsilon^p\}, \quad (10)$$

ahol $p \sim 0,45$ és $0,8$ közötti értékeket vehet fel. A kisebb értékek a tiszta anyaghoz, a nagyobbak pedig a nagyobb ötvözetartalomhoz tartoznak. Különböző Al ötvözetekre dróthúzási, csavarási és kompressziós deformáció során [16–17] az N szorzó-faktor $0,23$ és 16 közötti értékeket vehet fel.



5. ábra. A keményedési sebesség és a folyásfeszültség közötti összefüggés Cu—1% Co ötvözet csavarása esetén. $(\tau_s)_{ap}$ a lineáris szakaszból extrapolált telítési feszültséget, míg τ_s a tényleges telítési feszültséget jelöli [18]

Az alakítási keményedés sebessége definíció szerint: $\theta = \frac{d\sigma}{d\varepsilon}$. Ez a mennyiség σ és ε függvényében is monoton csökken. Elég nagy deformációk esetén az alakítási keményedés egy jelentős szakaszában a θ és a σ közötti kapcsolat általában lineáris (5. ábra). $\theta=0$ -ra extrapolálva kijelölhetjük azt a τ_s telítési feszültséget, amelynél a feszültség konstans értéke mellett állandó $\dot{\varepsilon}_s$ sebességgel megy végbe a plasztikus alakváltozás („steady-state flow”). Ez az alakváltozási szakasz magashőmérsékleti kúszással is vizsgálható, ahol a kísérleti módszer biztosítja az állandó feszültséget. Mecking szerint [19] a σ_s , $\dot{\varepsilon}_s$ és a hőmérséklet közötti összefüggés mind a kúszási vizsgálat, mind pedig a feszültség-deformáció görbéket adó más mechanikai vizsgálatok során ugyanaz; azaz az állandó folyás szakaszában az anyag viselkedése független az előélettől.

Gyakori eset az irodalomban, hogy nyújtási vizsgálat alapján következtetnek a telítési feszültségre. Ekkor ugyanis szintén észlelhető az alakítási keményedés sebességében egy, az 5. ábrán láthatóhoz hasonló lineáris szakasz, de az anyag hamar el-

szakad, ezért a telítési feszültség még kevésbé érhető el, és az egyenes szakasz extrapolálásával következtetnek τ_s értékére. Az igen nagy deformációk esetén (pl. dróthúzásnál, csavarásnál) a $\theta - \sigma$ görbe menete nagyobb deformációknál lényegesen eltér az extrapolált egyenestől [19, 20–22], ezért a valódi telítési feszültség mintegy 15–20 százalékkal nagyobb (l. 5. ábrát). *Mecking* és *Grinberg* szerint [23] ez a viselkedés az alakítás során bekövetkező geometriai szemcseméret-csökkenés következménye.

A nagy deformációk esetén fellépő mikroszerkezeti mechanizmusokat és az alakítási keményedési görbék értelmezését a következő pontban tárgyaljuk.

4. A deformált állapot struktúrája

A deformáció növekedésével a szemcsék alakja erősen megváltozik és ezért egyre jobban nő a szemcsehatárok mennyisége is. A csavarási vizsgálat kivételével, ahol ez a növekedés nem számottevő, a nagy deformáció igen elnyúlt, kis átmérőjű szemcsékre vezet. Például dróthúzás esetén $100 \mu\text{m}$ átlagos szemcsemérettől elindulva 10 000-szeres hosszúságnövekedés után ($\bar{\epsilon} \approx 10$) mintegy $10 \mu\text{m}$ átmérőjű, 1 m hosszúságú „szálas” szemcséket kellene kapnunk. A valóságban soha nem figyelhető meg ilyen kis átmérőjű szemcse, amelynek magyarázata az alakítás közben végbemenő dinamikus rekrisztallizáció lehet. *Nutting* szerint [24] ha feltesszük, hogy a szemcsehatár-energia állandó, akkor az egyre növekedő szemcsehatárfelület miatt az egységnyi térfogatban tárolt energia egyre nő. Egy kritikus érték elérése után a tárolt energia már olyan nagy lesz, hogy bekövetkezik a rekrisztallizáció. Ez végül arra vezet, hogy a folyásfeszültség egy állandó, telítési értéket ér el (σ_s). (A szemcsehatár-energia állandóságának feltételét az indokolja, hogy bár a deformáció megváltoztatja a szemcsehatár finomszerkezetét, és ez a szemcsehatár-energia növekedésével jár, de orientációváltozás is történik a szomszédos szemcsék között (textúrá sodás) és ez pedig csökkenti a szemcsehatár-energiát.)

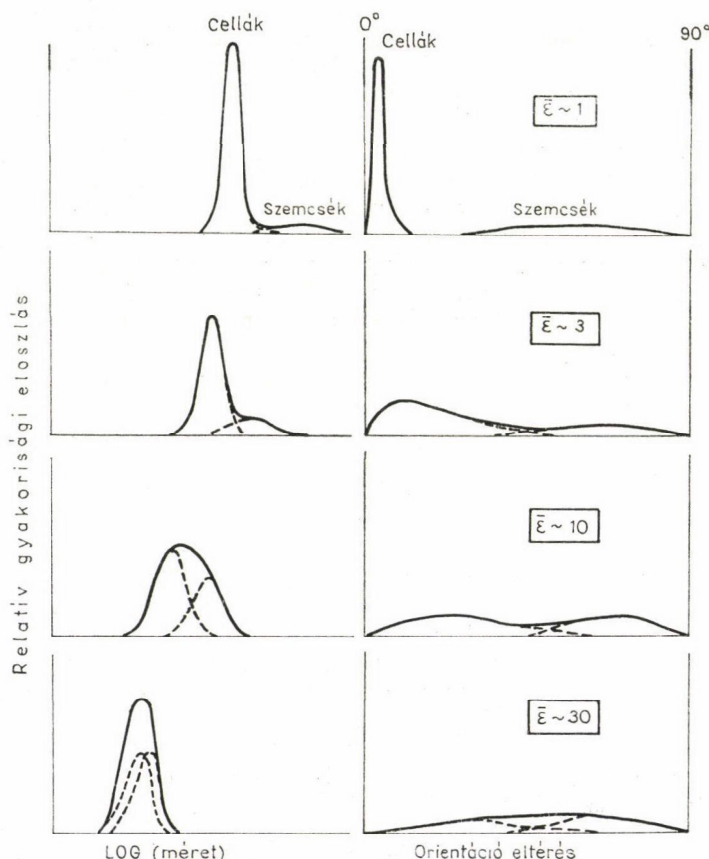
Ez az elképzelés csak a magasabb hőmérsékletek esetén tapasztalt állandó sebességű folyást magyarázhatja meg, alacsonyabb hőmérsékleten a deformációs szubszerkezet dinamikájával lehet csak értelmezni a telítési feszültségnél fellépő állandó sebességű plasztikus folyást.

A polikristályos anyag deformációja során először a szemcséken belüli deformációs struktúra megjelenése figyelhető meg, majd nagy deformációknál kialakulnak a több szemcsére is kiterjedő struktúrák. A deformáció előrehaladásával az egyes krisztallitok különböző orientációjú részekre bomlanak, amelyeket a sok elemi csúszásból felépülő csúszási sávok választanak el egymástól. Jellemző, hogy a nagy rétegződési hiba energiájú fémekben a deformáció kezdetén a csúszási sávok az egyes krisztallitokon belül egyenletesen oszlanak el, míg az alacsony rétegződési hiba energiájú anyagokban ezeknek az egyenletes eloszlása csak a közepes deformációktól figyelhető meg, ugyanitt nagy deformációk esetén mikroikrek és mikroikerhalmazok is megjelennek.

A mechanikai alakítás hatására fellépő ikresedés csak a nagy deformációk esetén, rendszerint alacsony hőmérsékleteken mehet végbe. Egy ikerhatár kialakulása ugyanis az $\{111\}$ síkokon $\langle 211 \rangle$ típusú csúszást jelent, amelynek a kritikus csúsztató feszültsége lényegesen nagyobb, mint a teljes diszlokációk mozgásával megvalósuló $\{111\} \langle 110 \rangle$ típusú csúszás. Ezért a mechanikai ikrek aktiválása csak a folyásfeszültség növelésével, lényeges mértékű alakítási keményedés után érhető el. A jelenlegi

elképzelések szerint [25] az ikek kialakulásában lényeges szerepet játszanak az alakítási keményedés során termelődő, az egy forrás körül koncentrikusan felhalmozódó diszlokáció feltorlódások („pile-up”-ok), amelyek feszültségtere besegít az ikerhatárok kiterjedését megvalósító parciális diszlokációk elmozdításába.

Az egyes szemcséken belüli diszlokációszerkezet csak a kis deformációknál homogén. Már az alakváltozás II. szakaszában a diszlokációk eloszlása olyan átrendeződést mutat, amelynek eredményeképpen a szemcsehatárok közelében nagyobb a diszlokációsűrűség, mint a szemcsék belsejében. Ez a „kétfázisú” viselkedés az alakváltozás III. szakaszának elején arra vezet, hogy a diszlokációk kötegekbe rendeződésével (kb. 15–20 százalékos deformáció után) olyan jellegzetes cellaszerkezet alakul ki, amelyben a cellák többsége a szemcsehatárok közelében helyezkedik el. A szemcsék belsejében nagyobb méretű, kisebb diszlokációsűrűségű fallal határolt cellák vannak, míg a határok közelében a cellák mérete kisebb és ezért a diszlokációsűrűség ott az alakváltozás III. szakaszában továbbra is nagyobb. Ez a jelenség magyarázhatja



6. ábra. A cellák és szemcsék mérete és orientációváltozása a deformáció függvényében (sematikus [26]).

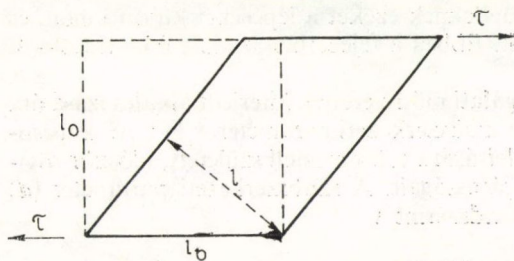
meg azt a tényt, hogy a kisszemcsés anyagok kezdetben nagyon meredek feszültség-deformáció görbéi sokkal kisebb deformációknál laposodnak el, mint a nagyszemcsés anyagok esetében.

Az egyes cellafalak egymástól néhány fokkal különböző orientációjú cellákat határolnak („misorientation”). A diszlokáció cellák megjelenése egy dinamikus megújulási folyamat, amelyben a diszlokációk csoportosulásával a nagy hatótávolságú feszültségek csökkennek és a cellafalakban fellépő diszlokáció annihilációval a diszlokációsűrűség növekedési üteme is lassul. A cellafalak kialakulása után az anyag összetételétől függő nagyobb deformációknál a cellák körvonala egyre élesedik, végül nem különböztethetők meg a tényleges szemcsehatároktól, azaz szubszemcsékké válnak. Eközben a cellák átlagos orientáció eltérése folyamatosan növekszik, méretük pedig csökken, ezért végül a valódi szemcsék és a szubszemcsék gyakorisági eloszlása közel azonos lesz. Ezt a folyamatot illusztrálja sematikusán a 6. ábra.

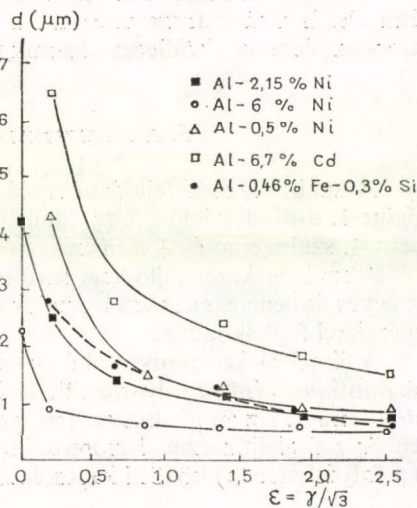
A cellák átmérőjének csökkenési sebessége nem egyezik meg a szemcsék méretének változási sebességével. Például csavarási deformáció esetén, ha az egyszerűség kedvéért $l_0 \times l_0$ méretű kocka alakú szemcsét csavarunk (7. ábra), akkor γ nyírási deformáció után az elnyúlt szemcse kisebbik átmérője

$$l = l_0(1 + 3\varepsilon^2)^{-1/2},$$

ahol $\varepsilon = \gamma/\sqrt{3}$, az ekvivalens deformáció. Ha a cellák méretcsökkenési üteme azonos lenne az l változási sebességével, akkor pl. $\varepsilon = 1$ esetén $l = l_0/2$, tehát a cellák átlagos átmérőjének is kb. a felére kellene csökkenie. Lloyd és Kenny [16] különböző Al ötvözetekben csavarási deformáció során mérte a cellaméret csökkenését az ekvivalens



7. ábra. Kocka alakú szemcse nyírása



8. ábra. A szubszemcse méret változása csavarás esetén az ekvivalens deformáció függvényében. Az ekvivalens deformációt a szerzők (Lloyd és Kenny [16]) a Mises-feltétel alapján számolták: $\varepsilon = \gamma/\sqrt{3}$

deformáció függvényében (8. ábra). Előző eredményünket a 8. ábra adataival összevetve megállapítható, hogy az $\varepsilon=1$ deformációig a szubszemcsék méretcsökkenése lényegesen gyorsabb, mint ahogy azt a szemcsék geometriai méretváltozásából várnánk. A nagyobb deformációk esetén viszont a szubszemcseméret egy konstans értékhez tart, tehát ott a szubszemcseméret-csökkenés üteme lesz lassúbb a szemcsék geometriai méretváltozásánál. Hasonló eredmények születtek a más módon végrehajtott deformációk során is (hengerlés: [27]).

Ezekből a megállapításokból azt a következtetést kell levonnunk, hogy a cellastruktúra nem egy sztatikus állapot, hanem a deformáció előrehaladásával állandó dinamikus fejlődésen megy át. Egyes helyeken cellafalak bomlanak fel, másutt pedig új cellák jelennek meg. Ez a folytonos felépülés és lebomlás nagy deformációknál tart egy dinamikus egyensúlyi állapot felé, ahol az átlagos cellaméret már állandó marad.

Ötvözetek esetében a cellák dinamikus megújulási folyamatát befolyásolja az ötvöző anyag [17]. Alacsony ötvözetartalom esetén a diszlokáció-cella struktúra $\varepsilon=0,15-0,2$ deformációig létrejön és utána az átlagos méret csökken. A nagyobb oldott ötvözetkoncentráció leglényegesebb hatása, hogy mikor a szubszemcsék méretcsökkenése megáll, az alakítási keményedés továbbra is tart. Az oldott szennyező atomok ugyanis csökkentik a diszlokációk mozgékonyágát és olyan diszlokáció átrendeződést hozhatnak létre, amelyben az annihiláció még nehezebben megy végbe. Ebből a szempontból az Al-ban oldott Mg atomok hatása különösen effektív, mivel nagy az atomi méretkülönbség a szennyező és a mátrix atomok között. Ezért az oldott atomok rögzítik a diszlokációkat. Ennek hatása például a szobahőmérsékletű nyújtásnál a folyásfeszültség vibráló ingadozásában jelentkezik. Ebben az esetben az oldott atomok megállítják a szubszemcsék kialakulásának folyamatát még a nagy deformációk esetén is. Például az Al—3,3% Mg-ban még $\varepsilon=2$ deformáció után sem lehet látni éles határu szubszemcséket. Az ilyen típusú ötvözetekben tehát a diszlokációk átrendeződése az elsődleges dinamikus megújulási folyamat.

5. A szubszerkezet fejlődését leíró modellek

A szubszerkezet fejlődése röviden összefoglalva a következő lépéseken megy végig: 1. a diszlokációk háromdimenziós eloszlása; 2. cellák; 3. cellák + szubszemcsék; 4. szubszemcsék + szemcsék.

A szubszerkezet fejlődését leíró modelleknek ezeket a lépéseket külön-külön, és az egyes átmeneteket is értelmezniük kell. Ebben a fejezetben a most felsorolt 2—4. lépésekkel foglalkozunk.

A fémek elektronmikroszkópos vizsgálati módszerének kiterjedt alkalmazása óta központi probléma a folyásfeszültség és a szubszerkezeti paraméterek közötti kapcsolatok leírása. Az empirikus eredmények leírására több modell született, először röviden összefoglaljuk ezek legfontosabb sajátosságait. A szubszerkezeti paraméter (d) és a folyáshatár (σ) közötti kapcsolatot rendszerint a

$$\sigma = \sigma_0 + Kd^{-m} \quad (11)$$

típusú összefüggés formájában keresik, amelyben az m értéke 1 és $1/2$ között változik. Ha d a szemcsék átlagos legkisebb méretét jelöli, akkor $m=1/2$ esetén a (11) összefüggés a jól ismert Hall—Petch-egyenlet. A deformáció során a cellák, illetve a szub-

szemcsék kialakulásával a d paraméter a cella, illetve szubszemcse legkisebb átlagos méretét jelöli. Az irodalomban az egyik fő kérdés a legjobban illeszkedő m kitevő értékének a meghatározása. A mérések szerint ugyanis mind az $m=1/2$ és $m=1$ kitevő esetén a (11) összefüggés jól illeszthető a mérési eredményekhez. Eltérés csak az igen nagy deformációk esetén, tehát kis d értékek mellett jelentkezik, rendszerint ott, ahol a cellák és a szubszemcsék közötti átmenet van. Ez arra utal, hogy bár σ értékében a d paraméter lehet a legmeghatározóbb, más paramétereket is számításba kell venni. Ilyenek még például a szomszédos cellák és a szomszédos szubszemcsék közötti orientáció eltérés (9), a cellafalakon belüli diszlokáció sűrűség, (ρ), illetve a falakon belüli diszlokációk hossza (l). Nagy deformációk esetén ($\bar{\epsilon} > 1$) azonban nincs lehetőség a diszlokációsűrűség közvetlen mérésére és ezért az erre vonatkozó közvetett következtetés mindig valamilyen közelítést tartalmaz. (Például, nem mindegyik diszlokáció járul hozzá az orientáció eltéréshez, vannak rögzített, illetve könnyen elcsúszó diszlokációk, stb.) A felsorolt paraméterek a következő empirikus arányosságok szerinti kapcsolatban vannak a folyásfeszültséggel:

$$\sigma \sim d^{-1},$$

$$\sigma \sim d^{-1/2} \rho,$$

$$\sigma \sim l^{-1},$$

$$\sigma \sim \rho^{1/2}.$$

Az alakítási keményedést leíró modellek kiindulópontja egy adott diszlokáció elrendeződés, és a feladat meghatározni azt a kritikus csúsztató feszültséget, amely egy diszlokációnak a csúszási síkon történő elmozdításához szükséges (τ). Ez a mennyiség a külső makroszkopikus folyásfeszültséggel egy átlagos orientációs faktorral kapcsolható össze: $\bar{\sigma} = \bar{M}\tau$, ahol \bar{M} az adott szemcseszerkezetre a Taylor-faktor átlagát jelöli.

Ashby, Brown és Ham-modellje [28, 29] olyan diszlokációmozgás csúsztató feszültségét határozza meg, amelynél a diszlokáció egyik pontja a cella középpontjában, a másik végpontja pedig a cellafalon rögzített. A külső feszültség a csiga alakban kihajló diszlokációt a középpont körül körbehajtja, miközben a diszlokáció-hosszabbodásból származó szakaszt folyamatosan belepréseli a cellafalba. Ez a modell a diszlokáció csoportoktól származó nagy hatótávolságú feszültségeket elhanyagolja, ezért ez a csúsztató feszültség csak egy alsó korlátot ad:

$$\tau - \tau_0 \simeq A \frac{Gb}{2\pi(d_i/2)} \ln \left(\frac{d_i}{2b} \right),$$

ahol d_i a cellába írható legnagyobb kör sugarát jelenti, b a Burgers-vektor és G a nyírási modulusz.

A Kuhlmann—Wilsdorf elmélet [30] azt a csúsztató feszültséget határozza meg, amely egy diszlokáció átlagos l_s hosszúságú szabad, nem rögzített szakaszának a kihajlításához szükséges:

$$\tau - \tau_0 \simeq A \frac{Gb}{2\pi l_s} \ln \left(\frac{l_s}{b} \right).$$

Ebben az elméletben a legnagyobb gondot az l_s értékének a meghatározása jelenti, mivel ez az érték nagyon érzékeny a diszlokáció-eloszlásra. Mindamellett külön a cellákra és a szubszemcsekre számolt csúsztató feszültségek a cella, illetve a szubszemcse méret reciprokával arányosak.

Li [31—32] egyszerű dőlt határnak tekintve a szubszemcsehatárt meghatározta annak erősségét, amely az orientációeltéréstől (9) függő érték. Számításai szerint egy diszlokáció emittálása a határból, vagy egy forrás aktiválása olyan pile-up feszültséggel történik, amelynek a karakterisztikus hossza a szubszemcse mérete (d_s):

$$\tau - \tau_0 \approx \frac{0,27}{1 - \nu} Gb^{1/2} g^{1/2} d_s^{-1/2}.$$

Ez az összefüggés a kísérleti eredményekkel jól összevág. Li szerint az orientációeltérés növekedésével a felhalmozódott pile-up feszültségek segítségével a rögzített diszlokációk egy része szabaddá válik, és nagy deformációknál ez a mechanizmus hozzá létre a képlékeny alakváltozást.

Langford és Cohen [20, 33] a cellafalakat a diszlokációk számára áthatolhatatlannak tekintve meghatározta azt a plasztikus munkát, amely egy diszlokáció hurok kezdeti és végső állapota közötti átmenethez szükséges. Ebből a számolásból a csúsztató feszültségre egy olyan alsó határt lehetett kapni, amely a mérési eredmények legtöbbször valóban reális érték.

Az erdő-diszlokációkkal modellezve a cellafalakat, az átmetszésükhöz szükséges feszültség meghatározásával többen foglalkoztak [34—36]. Shoeck és Frydman az erdő diszlokációk erősségének gyakorisági eloszlását elemezték és eredményüket egyesítve Foreman és Makin térbeli véletlenszerű erősségeloszlás számolásával fcc kristályra a következő eredményt kapták:

$$\tau - \tau_0 \approx [0,043 \ln (\varrho_s^{-1/2}/b)] Gb \varrho_s^{1/2},$$

ahol ϱ_s a diszlokációk síkbeli sűrűsége.

Seeger és munkatársai szerint [37] a „pile-up”-októl származó nagy hatótávolságú feszültségek határozzák meg a kritikus csúsztató feszültséget:

$$\tau - \tau_0 \approx \frac{\pi n}{2\beta} GbL^{-1},$$

ahol L a „pile-up” mérete. Ezt az eredményt kétségessé teszi, hogy az elektronmikroszkópos megfigyelések szerint [38] nem minden esetben láthatók a Seeger-moddal működéséhez szükséges „pile-up”-struktúrák.

A szubszerkezet fejlődésének 2. lépését, azaz a háromdimenziós diszlokáció struktúrájának a rendezettebb, cellastruktúrába való átalakulását Holt szerint [39—40] a szabadenergia csökkenésére vezető hajtóerő biztosítja. Holt párhuzamos, egyenletes eloszlású csavardiszlokációk rendszeréből elindulva (kizárva a diszlokáció annihiláció lehetőségét) megmutatta, hogy a diszlokációk halmazokban való tömörülése analóg a túltelített oldatok spinodal—széteséséhez. Az analógia eredménye továbbá, hogy a cellák átlagos átmérője fordítva arányos a diszlokáció sűrűség négyzetgyökével, amely az empirikus eredményekkel egyező. Mivel a Holt-modell nulla külső feszültségre vonatkozik, érvényessége inkább a sztatikus megújulásra, mint a képlékeny hidegalakításra vonatkozhat.

A problémakör más termodinamikai megközelítései figyelembe veszik a külső feszültség hatását. *Karashima* és munkatársai *Takeuchi* nyomán [41–42] arra a következtetésre jutottak, hogy a cellás struktúrába való átmenet feltétele az, hogy a diszlokációeloszlás állandó deformációs sebesség mellett olyan legyen, amely mellett a külső feszültség minimális.

6. A nagy deformációk esetén fellépő jellegzetes effektusok

Az erősen deformált állapot legfontosabb jellegzetessége, hogy a közepesen nagy deformációktól kezdve a cellastruktúra egy állandósult állapot felé tart. Az igen nagy deformációknál fellépő nagy szemcsehatárfelület növekedés miatt (kivéve a csavarásnál) a szemcsehatárok közvetett módon befolyásolhatják a cellák szerkezetét, mivel a szemcsék mérete a cellák méretskálájába esik.

a) Polikristályokban a szemcseméret a deformációval oly mértékben megváltozik, hogy nagy deformációknál a szemcseméret-hatások jelentőssé válnak. Bár a szemcsehatárok közvetlenül nem határozzák meg a folyásfeszültséget, a nagy deformációknál fellépő nagy szemcsehatárfelület növekedés miatt (kivéve a csavarásnál) a szemcsehatárok közvetett módon befolyásolhatják a cellák szerkezetét, mivel a szemcsék mérete a cellák méretskálájába esik.

b) Nagy deformáció esetén a deformáció nem marad homogén, mivel erős deformációs sávok alakulnak ki. Az egyes szemcsék erősen különböző orientációjú részekre bomlanak, amelyet keskeny átmeneti réteg határol, nagy orientáció gradienssel. Ugyanúgy, mint a szemcsék esetében, nagy deformációknál ezek a sávok is erősen összenyomódnak, és méretük a szubszemcsék méretskálájába esik, ezért befolyásolhatják azok fejlődését.

c) Olyan minták esetében, amelyeknek a kiindulási mérete nem elegendően nagy, nagy deformációk esetén felületi hatások is felléphetnek.

d) Az esetleges ikresedés, vagy martenzites átalakulás új szemcséket, illetve szemcsehatárokat alakíthat ki, amelyek szintén befolyásolják a folyásfeszültséget és a szubszerkezet fejlődését.

e) Nagy deformációk esetén makroszkopikus és mikroszkopikus deformációs instabilitás léphet fel.

f) Állandósult struktúra csak akkor várható, ha közben a deformációs módot nem változtatják meg. A technikai gyakorlatban ez a műveletek során rendszerint erősen változó, amelynek során a szubszerkezet fejlődése más irányba fordul.

g) Nagy deformációk esetén speciális textúra alakul ki, amelynek egyik következménye a külső feszültség más ütemű változása, a Taylor-faktor változása miatt. Továbbá minden szemcse elfordul, és ezért új csúszási rendszerek aktiválódnak. A szemcsék különböző orientáció-változása miatt nyírási deformációjuk lényegesen eltérő lehet, amelynek következtében az egyes szemcsék az alakítási keményedés más-más állapotában vannak. Ha M jelöli adott szemcse orientációs faktorát, τ pedig a csúszósíkban vett folyási feszültséget, akkor $M\tau$ értéke szemcséről szemcsére körülbelül kettes faktorialis lehet különböző.

h) Második fázisú részecskék is erősen befolyásolhatják a szubszerkezetet, mivel folyamatosan változtatják az egymáshoz képesti relatív helyzetüket. Ezzel megakadályozhatják pl. az állandósult szerkezet kialakulását.

A felsorolt problémáknak az elméleti számbavétele jelenleg még nem mindig lehetséges. Ennek egyik lényeges akadálya a probléma nehézsége, másrészt az, hogy nem áll rendelkezésre még elegendő kísérleti adat ahhoz, hogy az effektusok számbavételéhez megfelelő elméleti kiindulópontot lehessen kialakítani.

7. Textúrák

Ha egy fémre azt mondjuk, hogy polikristályos szerkezetű, ez egyáltalán nem jelenti azt, hogy benne a szemcsék teljesen véletlenszerű orientációval helyezkednek el. Már az előállítási műveletek során is a szemcsék többféle közös, kitüntetett orientációs irány felé rendeződnek, azaz textúra jön létre. Így ismeretes öntési, hőkezelési és deformációs textúra. Jelen dolgozatban csak a deformációs textúrával foglalkozunk, azon belül is korlátozódunk az fcc fémekre.

A textúrák szerkezet feltérképezésének legelterjedtebb módszere a röntgen transzmissziós vagy reflexiós szórás vizsgálat. A mintát olyan pozícióba helyezik el a beeső sugárnyaláb és a detektor között, hogy valamelyik előre meghatározott hkl síksereg teljessüljön a Bragg-reflexió. Fontos, hogy a nyaláb egyszerre nagyszámú szemcsét fogjon be, különben a detektor csak diszkrét mintapozíciókban fog sugárzást érzékelni. A vizsgálat során a mintát két egymásra merőleges tengely körül forgatják (RD és TD tengelyek) és közben folyamatosan mérik az észlelt sugárzás intenzitását. Az egyenlő intenzitású görbéket az RD—TD koordináta-rendszerben ábrázolva kapják az ún. pólusábrákat. Attól függően, hogy melyik $\{hkl\}$ síksereg volt kiválasztva, beszélünk $\{111\}$, $\{100\}$, stb. pólusábrákról. Ha valamilyen textúra van az anyagban, akkor a pólusábra különböző pontjainak környezetében egy-egy intenzitás-maximum észlelhető.

Az egyes szemcséknek a minta referenciarendszeréhez képesti térbeli orientációját az Euler-szögekkel adják meg ($\varphi_1, \Phi, \varphi_2$), amelyek az egyes szemcsék $\langle 100 \rangle$ irányainak és a mintához rögzített derékszögű koordináta rendszer tengelyeinek az egymáshoz képesti irányát jellemzik.

A deformáció módjától függően háromféle textúratípust különböztetünk meg: szálas, hengerlési és cső, illetve nyírási textúrát. A következőkben ezek legfontosabb jellemzőit soroljuk fel.

a) *Szálas textúra* az egytengelyű deformáció esetében alakul ki. Létrejöhet tehát nyújtás, összenyomás, kovácsolás, dróthúzás és rúd-hengerlés során. A legtöbb esetben kettős textúráról van szó, amelyben a szemcsék egy része $\langle 111 \rangle$, a többi része pedig $\langle 100 \rangle$ irányban helyezkedik el a minta szimmetriatengelyének irányához képest. E kétféle textúra relatív aránya az anyagtól függ. Ezt az arányt mutatja ötféle tiszta fém esetére a II. táblázat.

A kétféle textúra egymáshoz való aránya erősen függ a deformáció nagyságától és a tisztaságtól. Többen kimutatták, hogy a szálas textúra végső stabil állapota az $\langle 111 \rangle$ textúra lehet. A textúra milyensége erősen függ továbbá a deformáció sebességétől és a hőmérséklettől is.

Egy mintán belül a különböző textúrájú területek diszlokáció sűrűsége erősen eltérő. Horiuchi és munkatársai [45], valamint Noda és munkatársai [46] mérései szerint az $\langle 111 \rangle$ zónákban nagyobb a diszlokációsűrűség az $\langle 100 \rangle$ zónákhoz képest.

b) *Hengerlés után* az anyagon belül a különböző textúrájú területek keverékét lehet megfigyelni. Valamennyi szemcse olyan vastagságú koronggá válik, mint amenny-

II. TÁBLÁZAT

Az $\langle 100 \rangle$ és az $\langle 111 \rangle$ „szálas” textúrák térfogatszázaléka tiszta felületcentrált köbös fémek esetén

	Az $\langle 100 \rangle$ és $\langle 111 \rangle$ helyzetű szemcsék térfogatszázaléka				
	Schmid és Wassermann [43]		Ahlborn és Wassermann [44]		
	$\langle 100 \rangle$	$\langle 111 \rangle$	$\langle 100 \rangle$	$\langle 111 \rangle$	Tisztaság
Alumínium	0	100	8	92	99,5%
Réz	40	60	34	66	Elektrolit- réz
Arany	50	50	16	84	99,99%
Nikkel			27	73	99,5%
Ezüst	75	25	54	46	99,99%

nyi a makroszkopikus deformációból következik, azonban a másik két dimenziójuk kisebb annál, mint amennyi a makroszkopikus deformációnak megfelel [47]. A különböző textúrák közös jellegzetessége, hogy a korongok normálvektora egyben a textúra iránya is. Az első mérések $\{110\}$ $\langle 112 \rangle$ és $\{112\}$ $\langle 111 \rangle$ textúrákat mutattak ki. Itt a $\{hkl\}$ a hengerlési síkot, az $\langle uvw \rangle$ pedig a hengerlés irányát jelöli. Az $\{111\}$ pólusárak az anyagtól függően kétféle típusúak lehetnek: α sárgaréz, illetve réz típusúak. Ez utóbbit irracionális textúrának is nevezik. Ebben a körülményektől függően az előbb felsorolt textúrák mellett előfordulhat $\{123\}$ $\langle 412 \rangle$ és $\{135\}$ $\langle 211 \rangle$ textúra is. Az α sárgaréz és a réz típus közötti alapvető különbség az ötvözőanyag hatása, az előbbit ötvözet-típusnak, az utóbbit pedig tiszta-fém típusnak is nevezik.

c) A cső, illetve a nyírási textúrát csövek és rudak húzásával, illetve csavarásával vizsgálják. A csövek esetében külön-külön a falvastagság és a kerület csökkenésének mértékétől függ a textúra. Például állandó átmérő mellett csak a falvastagság csökkentésével olyan textúra érhető el, amely teljesen hasonló a hengerlési textúrához

III. TÁBLÁZAT

A nyírási textúrák tiszta felületcentrált köbös fémek esetén [48]

Fém	Nyírási textúra komponensek
Alumínium	(100) $[011]$ (111) szálas textúra (111) $[\bar{1}12]$ (111) $[\bar{1}\bar{1}0]$
Réz	(100) $[011]$ (111) szálas textúra (111) $[\bar{1}12]$ (111) $[\bar{1}\bar{1}0]$ (112) $[\bar{1}\bar{1}0]$
Ólom	(100) $[011]$ (111) szálas textúra (111) $[\bar{1}12]$
Ezüst	(112) $[\bar{1}\bar{1}0]$

A nagy alakítással húzott réz csövekben, ha a falvastagság és az átmérő-csökkenés azonos arányú, a textúra két fő komponensből áll: $\langle 100 \rangle_L \langle 011 \rangle_R$ és az $\langle 111 \rangle_L \langle 112 \rangle_R$ -től az $\langle 111 \rangle_L \langle 110 \rangle_R$ -ig, ahol L a hossz tengely, R pedig a sugár irányát jelöli.

A nyírási textúra megadásánál a $(hkl) [uvw]$ jelölésrendszert használják, ahol (hkl) a nyírási síkot, $[uvw]$ pedig a nyírási irányt jelöli. A különböző fémek nyírása esetén megfigyelt textúrákat foglalja össze a III. táblázat [48].

Backofen [49, 50] és *Williams* [51] kimutatták, hogy a nyírási textúra már viszonylag alacsony ($\gamma=0,54$) deformációnál teljesen kifejlődik, és a nyírási irány megfordításával a textúra fő jellegzetessége megmarad.

8. Összefoglalás

Jelen dolgozatban röviden összefoglaltuk a polikristályos anyagok nagymértékű deformálásával kapcsolatos legfontosabb ismereteket. Foglalkoztunk a különböző deformálási módok összehasonlításához szükséges ekvivalens feszültség és ekvivalens deformáció fogalmának a tisztázásával. Ez a kérdés az irodalomban még nincs egyértelműen kidolgozva. Ígéretesnek látszanak a számítógépes eljárással kapható eredmények. A nagy alakváltozás során textúra fejlődik ki, amelynek karaktere erősen függ a deformálási módtól és jelentősen befolyásolja a feszültség-deformáció görbe alakját. Számos olyan hatás ismeretes, amely jelenleg még nagymértékben megnehezíti a nagy deformációk egyértelmű jellemzését.

IRODALOM

1. *K. Lange*, Lehrbuch der Umformtechnik, Springer Verlag, Berlin, 1971.
2. *G. I. Taylor*, J. Inst. Met. 62, 307, 1938.
3. *G. Sachs*, Z. Verein Deut. Ing. 72, 734, 1928.
4. *E. A. Calnan* and *C. J. B. Clews*, Phil. Mag. 41, 1085, 1950.
5. *T. Leffers*, Computer Simulation of the Plastic Deformation in Face-centered Cubic Polycrystals and the Rolling Texture Derived, Risø Report no. 184, Danish Atomic Energy Commission, Research Establishment, Risø, Roskilde, Denmark. 1968.
6. *E. Kröner*, Acta Met. 9, 155, 1961.
7. *R. von Mises*, Gött. Nachricht. Math. Phys. 582, 1913.
8. *H. Tresca*, Mém. prés. por. div. savants, 18, 733, 1868.
9. *L. S. Tóth* and *I. Kovács*, J. Mat. Sci., (1985), megjelenés alatt.
10. *L. S. Tóth*, *I. Kovács*, *J. Lendvai* and *B. Albert*, J. Mat. Sci., 19, 683, 1984.
11. *L. S. Tóth*, *I. Kovács*, J. Mat. Sci., 17, 43, 1982.
12. *J. Gil Sevillano*, *P. van Houtte* and *E. Aernoudt*, Progr. Mat. Sci. 25, 69, 1980.
13. *E. C. Voce*, J. Inst. Metals, 74, 537, 1948.
14. *Kovács I.*, Magyar Fizikai Folyóirat, 25, 113, 1977.
15. *J. E. Hockett* and *O. D. Sherby*, J. Mech. Phys. Solids, 23, 87, 1975.
16. *D. J. Lloyd* and *D. Kenny*, Acta Met. 28, 639, 1980.
17. *D. J. Lloyd* and *D. Kenny*, Met. Trans. 13A, 1445, 1982.
18. *S. Tóth L.*, nem publikált eredmény.
19. *H. Mecking*, *K. Lücke*, Acta Met. 17, 279, 1969.
20. *G. Langford* and *M. Cohen*, Trans. ASM, 62, 623, 1969.
21. *D. J. Lloyd* and *D. Kenny*, Scripta Met. 12, 903, 1978.
22. *P. van Houtte*, *J. Gil Sevillano* and *F. Aernoudt*, Z. Metallkde. 70, 503, 1979.
23. *H. Mecking* and *A. Grinberg*, "Strength of Metals and Alloys", Proceedings of the 5th International Conference, Pt. I, Aachen, Germany, 27—31 Aug. Pergamon, New York, 1979. p. 289.
24. *J. Nutting*, Proc. 8th Int. Congress on Electron Microscopy, Vol. I. Cambera, Australia, 1974. p. 580.

25. J. A. Venables, *Phil. Mag.* 6, 379, 1961.
26. G. Langford and M. Cohen, *Metall. Trans.* 6A, 901, 1975.
27. F. Schuh and M. von Heimendahl, *Z. Metallkde.* 65, 346, 1974.
28. M. F. Ashby, *Acta Met.* 14, 679, 1966.
29. L. M. Brown and R. K. Ham, *Strengthening Methods in Crystals*, eds. A. Kelly and R. B. Nicholson, Applied Science, London, 1971. p. 12.
30. D. Kuhlmann-Wilsdorf, *Work Hardening in Tension and Fatigue*, ed. A. W. Thompson, AIME, New York, 1977. p. 1.
31. J. C. M. Li, *Trans AIME.* 227, 239, 1963.
32. J. C. M. Li, *Electron Microscopy and Strength of Crystals*, eds. G. Thomas and J. Washburn, Interscience, New York, 1963. p. 713.
33. G. Langford and M. Cohen, *Met. Trans.* 1, 1478, 1970.
34. U. F. Kocks, *Can. J. Phys.* 45, 737, 1967.
35. A. J. E. Foreman and M. J. Makin, *Can. J. Phys.* 45, 511, 1967.
36. G. Shoenck and R. Frydman, *Phys. stat. sol. (b)*, 53, 661, 1972.
37. A. Seeger, S. Mader and H. Kronmüller, *Electron Microscopy and Strength of Crystals*, eds. G. Thomas and J. Washburn, Interscience, New York, 1962. p. 665.
38. H. Mughrabi, *Constitutive Equations in Plasticity*, ed. A. Argon, MIT Press, Cambridge, Mass., 1975. p. 199.
39. D. L. Holt, *J. Appl. Phys.* 41, 3197, 1970.
40. D. L. Holt, *Proc. 2nd Int. Conf. on the Strength of Metals and Alloys*, Vol. 2. Asilomar, California, 1970. p. 477.
41. S. Karashima, K. Maruyama and N. Ono, *Trans. Jap. Inst. Met.* 15, 265, 1974.
42. S. Takeuchi, *J. Phys. Soc. Japan*, 27, 929, 1969.
43. C. S. Barrett, *The Structure of Metals*, 2nd edn. McGraw-Hill, New York, 1952.
44. H. Ahlborn and G. Wassermann, *Z. Metallkde.* 53, 422, 1962.
45. S. Hirouchi, K. Asakura, G. Wassermann and J. Grewen, *Texture*, 2, 17, 1975.
46. T. Noda, J. Grewen and G. Wassermann, *Z. Metallkde.* 67, 450, 1976.
47. F. Haessner, U. Jakubowsky and M. Wilkens, *Acta Met.* 14, 454, 1966.
48. I. L. Dillamore, W. T. Roberts, *Metallurgical Reviews*, 10, 271, 1965.
49. W. A. Backofen, *Trans. AIME.* 188, 1454, 1950.
50. W. A. Backofen and B. B. Hundy, *Trans. AIME.* 197, 61, 1953.
51. R. O. Williams, *Trans. Met. Soc. AIME.* 224, 129, 1962.

A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó és Nyomda főigazgatója
Műszaki szerkesztő: Sándor István
A kézirat a nyomdába érkezett: 1984. szeptember 18. — Terjedelem: 9,80 (A/5) iv
85-3801 — Szegedi Nyomda, Szeged — F. v.: Dobó József igazgató

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

TARTALOMJEGYZÉK

A KÉPLÉKENY ALAKVÁLTOZÁS MECHANIZMUSAI

Szerkesztő

Kovács István
ELTE, Általános Fizika Tanszék

1. *Ungár Tamás*: A diszlokáció szerkezet változása felületen centrált köbös egykristályok alakítási keményedése során 353
2. *Honyek Gyula*: Egykristályok ciklikus alakváltozása 379
3. *Lendvai János*: Alakváltozás többfázisú rendszerekben 393
4. *Kovács István*: Polikristályok rugalmas és képlékeny tulajdonságai 409
5. *Rajkovits Zsuzsa*: Alakítás összenyomással 429
6. *S. Tóth László*: Polikristályok nagy alakváltozásai 443

307.226

W.

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

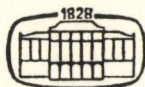
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXXIII. KÖTET

5–6. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1985

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADEMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 iv terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendőek:

Turchányi György egyetem tanár
Biofizikai Intézet
1444 Budapest VII., Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 120 Ft, Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest, V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215—11 488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218—10 990 útján eszközölhetők).

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölnék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

7. A KÚSZÁS MIKROMECHANIZMUSAI*

TASNÁDI PÉTER

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOM

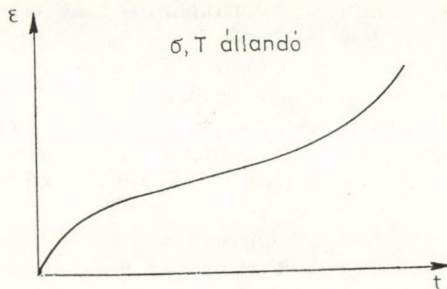
1. Bevezetés	463
2. A hatványtörvény szerint végbemenő kúszás különböző típusai	465
2.1. Tiszta fémek	465
2.2. I. típusú szilárd oldatok	469
2.3. II. típusú szilárd oldatok	469
2.4. Átmenet az I. és II. típusú viselkedés között	470
2.5. A belső feszültség szerepe	470
3. A diszlokációs kúszásra vonatkozó elméletek	471
3.1. Az I. típusú szilárd oldatokra vonatkozó elméletek	473
3.2. Tiszta fémekre és a II. típusú ötvözetekre vonatkozó elméletek	475
4. Összefoglalás	479
5. Irodalomjegyzék	479

1. BEVEZETÉS

A tartós folyás fenomenologikus leírásával és vizsgálati módszereivel az előző dolgozatokban már foglalkoztunk [1, 2]. Ebben a dolgozatban elsősorban a kúszási alakváltozást szabályozó mikromechanizmusokat tárgyaljuk. Bevezetésként azonban röviden összefoglaljuk a mikroszerkezeti tulajdonságok megértéséhez feltétlenül szükséges kísérleti eredményeket és fenomenologikus ismereteket.

A kúszási alakváltozás állandó feszültség mellett jön létre. Időbeli lefolyása sematikusan az 1. ábrán bemutatott $\varepsilon = \varepsilon(t)$ görbével jellemezhető. Látható, hogy a kezdeti „tranzienst” szakasz után általában egy állandó sebességű alakváltozás, az ún. stacionárius kúszás következik, majd az anyag egyre gyorsabban deformálódik és elszakad.

A kúszás jellegzetesen termikusan aktivált folyamat, így az $\varepsilon = \varepsilon(t)$ görbe alakját az alkalmazott feszültség mellett elsősorban a hőmérséklet befolyásolja. Az 1. ábrán látható tipikus kúszási görbe alakja a körülményektől függően többé-kevésbé megváltozhat, igen általános azonban, hogy a kúszási alakváltozásnak van stacionárius szakasza, azaz létezik egy vi-



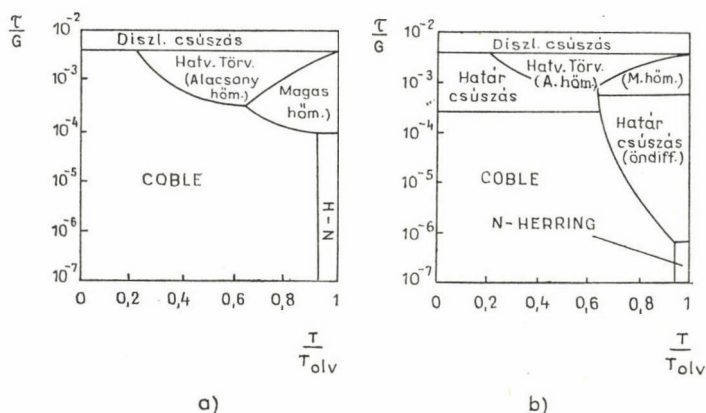
1. ábra. Tipikus $\varepsilon = \varepsilon(t)$ görbe

* Érkezett 1983. szept. 30.

szonylag nagy megnyúlás tartomány, amelyben az alakváltozás állandó sebességgel megy végbe.

A kúszásra vonatkozó elméletek többsége a stacionárius kúszás sebességének meghatározására vonatkozik. A továbbiakban ebben a dolgozatban is elsősorban ezt a folyamatot tárgyaljuk. A tranziens szakasszal csak a szubszerkezet kifejlődésének ismertetésekor foglalkozunk.

A különböző hőmérséklet és feszültségtartományokban a kúszási folyamatot erősen eltérő mikrofolyamatok határozzák meg. Ezeknek a folyamatoknak nagy vonalakban történő áttekintésére alkalmasak az *Ashby* által bevezetett [3, 4], majd az utóbbi években több más szerzőtől módosított ún. deformációs mechanizmus térképek [5–8].



2. ábra. Ashby-féle deformációs mechanizmus térkép 10 μm szemcseméretű nikkelle. a) Ashby és Frost nyomán, b) A Lüthy és munkatársaitól módosított formában

A 2. ábra 10 μm szemcseméretű nikkelle deformációs mechanizmus térképét mutatja Ashby és Frost nyomán [4], valamint a Lüthy és munkatársai által módosított alakban [7]. A térképről leolvasható, hogy a T_h homológ hőmérséklet és a normalizált nyírófeszültség függvényében milyen mikrofolyamatok irányítják a kúszást.

A fontosabb tartományok a következők:

1. Kis feszültségek és alacsonyabb homológ hőmérséklet mellett ún. Coble kúszás jön létre. A folyamatot a szemcsehatárok, illetve a diszlokáciomag mentén végbemenő diffúzió szabályozza.

2. Kis feszültség és az olvadásponthoz közeli hőmérséklet mellett Nabarro–Herring kúszás játszódik le. A folyamatot az öndiffúzió irányítja.

3. A feszültség növekedtével a kúszási folyamatot döntően a szemcsehatár csúszás szabja meg. A szemcsehatár csúszásban végbemenő diffúziós folyamatot $T_h < 0,6$ esetén a szemcsehatár diffúzió, $T_h > 0,6$ esetén pedig az öndiffúzió szabályozza.

4. A feszültség további növekedésével a kúszási folyamatok hatvány függvény szerint zajlanak le (power law creep). A tartós folyást ebben a tartományban diszlokáció kúszással járó folyamatok határozzák meg, amelyek aktiválási energiája alacsony homológ hőmérsékleten a határdiffúzió, nagyobb hőmérsékleten pedig az öndiffúzió aktiválási energiájával egyezik meg.

5. A folyásfeszültséghez közeledve a kúszás diszlokációcsúszással megy végbe.

A kúszási alakváltozás leggyakrabban vizsgált és elméletileg is legjobban kidolgozott része a hatványfüggvénnyel leírható tartomány.

Jelen dolgozatban is elsősorban ennek a tartománynak a vizsgálatára szorítkozunk.

2. A HATVÁNYTÖRVÉNY SZERINT VÉGBEMENŐ KÚSZÁS KÜLÖNBÖZŐ TÍPUSAI

A kúszásra vonatkozó konstitutív egyenletek legáltalánosabban az

$$\dot{\epsilon} = AD_B \frac{Gb}{kT} \left(\frac{b}{d}\right)^p \left(\frac{\sigma}{G}\right)^n \left(\frac{\Gamma}{Gb}\right)^m \left(\frac{D_M}{D_B}\right)^\alpha \quad (1)$$

alakban adhatók meg [9], ahol G a nyírási modulusz, b a Burgers-vektor, D_B és D_M a határ, illetve mátrix diffúziós együttható, σ a külső feszültség, Γ a rétegződési hiba energia, d a szemcseméret. A az anyagra, illetve a folyamatra jellemző állandó. A p , n , m és α kitevők értéke az anyagtól, illetve a kúszást szabályozó mechanizmustól függ. Az (1) összefüggés általában nemcsak a hatványtörvény szerint, tehát diszlokációs folyamatokkal szabályozott kúszás, hanem a diffúziós, illetve szemcsehatár csúszással végbemenő kúszás leírására is alkalmas.

A diszlokációs kúszás osztályozására az (1) egyenletben első közelítésben elegendő a feszültségfüggést figyelembe venni. A kísérleti tapasztalatok szerint a tiszta anyagok és az egyes egyfázisú ötvözetek esetén $n \approx 5$, míg más ötvözetekben $n \approx 3$ [10–11]. Ennek alapján Sherby és Burke [11] ezeket az ötvözeteket I. ($n=3$) és II. típusú ($n \neq 3$) szilárd oldatoknak nevezte. Az ötvözetek hasonló csoportosítását és elnevezését használják Langdon és munkatársai is [12, 13], a két csoport elnevezését azonban felcserélik. A következőkben röviden jellemezzük a tiszta fémek és a két ötvözet típus kúszási tulajdonságait [14].

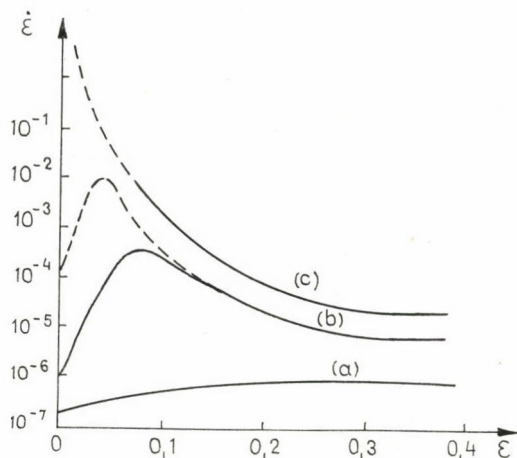
2.1. Tiszta fémek

A hőkezelt polikristályos anyagok szemcseszerkezete durva, diszlokációsűrűsége kicsi $\rho \sim 10^{-6} \text{ cm}^{-2}$. Ezek az anyagok általában igen lágyak, ezért terhelés hatására kezdetben igen gyorsan deformálódnak. A deformáció esetenként olyan gyors, hogy a deformációsebesség nem is mérhető. Az alakítási keményedés következtében azonban a deformáció növekedtével a deformációsebesség gyorsan csökken (3/c.) ábra).

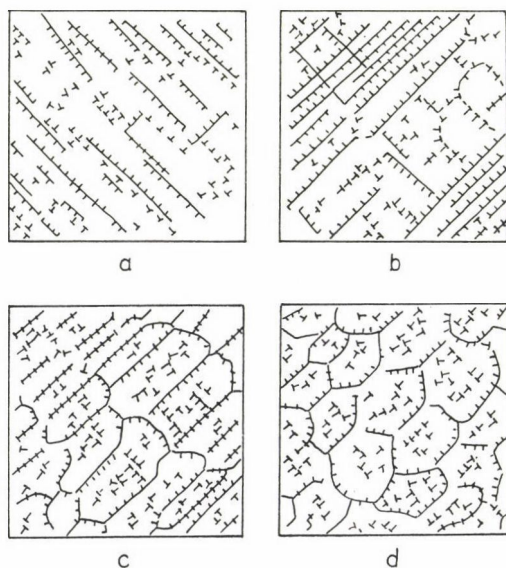
A 3. ábrán látható sematikus $\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}(\epsilon)$ grafikon mutatja, hogy a deformációsebesség a primer kúszás során nagyságrendekkel csökken, majd elegendően nagy megnyúlás után aszimptotikusan közelít egy stacionárius sebességértékhez. Az alakváltozás kezdeti szakaszán fellépő gyors deformációt az okozza, hogy tiszta anyagokban a diszlokációk mozgékonyasága igen nagy.

A kúszási alakváltozás során a tiszta fémekben a $T > 0,5 T_m$ hőmérséklettartományban és $\sigma \sim 10^{-4} G$ külső feszültség mellett jellegzetes diszlokációszerkezeti változások mennek végbe. A kicsiny ($\rho \sim 10^6 \text{ cm}^{-2}$) diszlokációsűrűség miatt a külső

feszültség sokkal nagyobb, mint a Taylor-formula szerint adódó belső feszültség, így a diszlokációk gyakorlatilag szabadon mozognak és sokszorozódnak. A felületen centrált köbös (fek) fémekben a Peierls feszültség elhanyagolható, ezért a diszlokációk közel hangsebességgel mozognak [15]. A gyors diszlokációmozgással kapcsolatos igen



3. ábra. Sematikus megnyúlás-megnyúlási sebesség grafikonok. ((a) I. típusú szilárd oldat, (b) II. típusú szilárd oldat, (c) tiszta fém)



4. ábra. A szubszerkezet kifejlődésének fokozatai
a) terhelés után, b), c) átmeneti szakasz,
d) stacionárius szerkezet

gyors alakváltozást egyes szerzők a terhelés hatására bekövetkező azonnali megnyúlásként értelmezik [12, 16]. A gyors deformáció addig tart, míg a diszlokációk feszültségtére összemérhetővé nem válik a külső feszültséggel.

A diszlokációeloszlás változásának és a szubszerkezet kifejlődésének megállapítására kiterjedt kísérleti vizsgálatokat folytattak. Fek egykristályok esetén tipikusnak tekinthetők a rézre [17–18], tércentrált, köbös (tck) kristályok esetén pedig a molibdénre [19] vonatkozó eredmények [20]. Ennek alapján a diszlokációszerkezet kifejlődésének jellegzetességei a következők.

A terhelés pillanatában a diszlokációeloszlás homogén, amelyből a kúszás primer szakaszán fokozatosan cellás, illetve szubszemcsékből álló szerkezet fejlődik ki. A szerkezet kifejlődésének szakaszait érzékelteti a 4. ábra. Alacsony hőmérsékleten ($T < 0,5 T_m$) a keményedés igen gyors, s az alakváltozási sebesség gyorsan zérusra csökken. Magas hőmérsékleten ($T > 0,5 T_m$) a termikus aktiválás miatt lehetséges a további diszlokációmozgás, így a kúszás nem szűnik meg. Tiszta fémekben a diszlokációmetszés, a keresztcsúszás, illetve a lépcsőket tartalmazó csavardiszlokációk vakancia diffúzió által kontrollált mozgása aktiválódhat. Ennek eredményeként bár a belső feszültség összemérhető a külsővel, a diszlokációmozgás folytatódik.

A lényeges szerkezeti változások a kúszás primer szakaszán történnek. A diszlokációk ekkor állnak össze kötegekké és képeznek cella-

falakat, illetve szubhatárokat. A stacionárius kúszás akkor következik be, amikor a szubszerkezet is állandósul, tehát sem az átlagos diszlokációsűrűség, sem a szubszemcseméret nem változik.

A szubszerkezeti változások és a kúszási mechanizmus közötti összefüggést az 5. ábrán látható jellegzetes kúszási görbén foglaltuk össze [14].

A szubszerkezet kifejlődésének a kúszásra gyakorolt egyik legfontosabb hatása, hogy a kúszási alakváltozást létrehozó szabad diszlokációk száma a primer kúszás során a megnyúlással csökken (6. ábra) [14]. Ez az eredmény kissé meglepő, hiszen a kúszási sebesség csökkenésével a diszlokációsűrűség növekedése jár együtt. A két tény azonban nem mond ellent egymásnak. A kúszási alakváltozás kifejlődése során a teljes diszlokációsűrűség nő, azonban a falak kialakulása miatt a szubszemcsék belsejében elhelyezkedő mozgóképes diszlokációk száma csökken.

Ismeretes, hogy a ρ_T teljes diszlokációsűrűség, a ρ_i mozgásképes diszlokációsűrűség, valamint az L átlagos szubszemcseméret is függ a külső feszültségtől. A stacionárius szakaszban a külső feszültség és a ρ_i diszlokációsűrűség között a

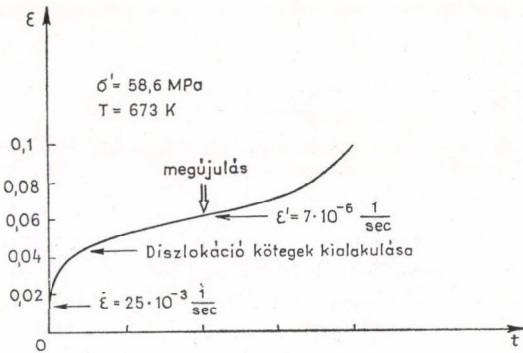
$$\sigma = \sigma_0 + \alpha_1 Gb \sqrt{\rho_i} \quad (2)$$

összefüggés áll fenn, ahol σ_0 az ún. súrlódási feszültség $\alpha_1 \sim 0,3$. Az összefüggést igen gyakran $\sigma_0 = 0$ feltevéssel is használják, s a kísérleti eredmények szerint egyes esetekben ρ_i kitevője is különbözhet 1/2-től. A különböző szerzők által kapott $\tau = \tau(\rho_i)$ összefüggéseket a [20] összefoglaló munka nyomán az 1. táblázat tartalmazza.

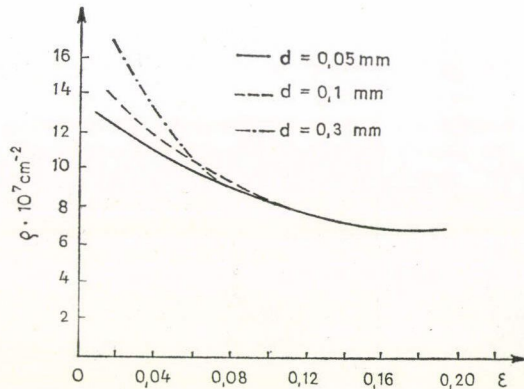
A külső feszültség és a szubszemcseméret között többnyire a

$$\tau = K \frac{Gb}{d} \quad (3)$$

összefüggés áll fenn, ahol d az átlagos szubszemcseméret [21], d kitevője azonban egyes esetekben eltérhet -1-től (1. táblázat).



5. ábra. A kúszási görbe és a szubszerkezet kapcsolata



6. ábra. A szabad diszlokációsűrűség változása a megnyúlással Fe-3% Si ötvözetre (915 K, 48 MPa)

1. TÁBLÁZAT

Anyag	Vizsg. módszer	l	α	m	K	Megjegyzés	Hiv.
Al	TEM	0,33 2	0,7	1	10	egykristály az adatok	130
	TEM			0,26			132
	EP			—			173
	TEM			1	13		127
	maratás			0,7			171
Cu	OP	1,5 2 2 2 0,95	2,6 0,6 0,6	0,7		meleg összenyomás	93
	TEM			1	13		131
	EP						110
	EP						113
	TEM			1	10		174
Fe	TEM			0,6		magashőn nyújtás	147
	TEM			0,6			120
	TEM			0,4			108
	TEM, EP			1	8		146
	TEM			0,4			148
Ni	TEM	2	0,7	1	5	csak 2 pontból	154
	W			1			164
	Zr						151
	Al—Mg						41
	TEM						136
Cu—Mo	TEM	1,6 1,7 2	1,5 0,35 2,6			5% Mg	138
	TEM					3,5% Mo	152
	EP					10% Ni	113
Cu—Zn	TEM	1,4 0,7 1,5 1,4		0,5	2	10% Zn	145
	Fe—Cr					20% Cr	150
	Fe—Mo					4% Mo	149
	Fe—3					(110)001	25
	EP					texturával kizárva a kifestült- ségű tartományt	106
Fe—3	TEM	1 2	1,4	1	7	316-os típus	151
	EP						84
	maratás						172
	TEM						162
Szin acél	TEM	2 1,4—2 2	0,4 1 1,5	0,8	7	20 Cr, 35 Ni 19 Cr, 10 Ni 20 Cr, 25 Ni és kiválások	156
	TEM						119
	TEM						157
Rozsdamentes acél	TEM	2	1,5	1	18	lassú nyújtás	161
						17 Cr, 12 Ni, 2 Mo	
W—5	TEM	2	0,4				165
W—Re	TEM	2,2	0,5			25 és 30% Re	165

A teljes diszlokációsűrűség és a külső feszültség között is találhatunk kapcsolatot, ha felhasználjuk, hogy a szubhatárok θ orientációkülönbsége

$$\varrho_s = \frac{3\theta}{bd} \quad (4)$$

geometriailag szükséges diszlokációkülönbséggel biztosítható, így (2), (3) és (4) fel-

használásával

$$\varrho_T = \varrho_s + \varrho_i = \frac{\sigma}{Gb^2} \left(\frac{3\Theta}{K} + \frac{\sigma}{\alpha^2 G} \right) \quad (5)$$

adódik.

2.2. I. típusú szilárd oldatok

Ezekre az anyagokra vonatkozóan a stacionárius kúszást leíró (1) összefüggésben a feszültség kitevője 3, és $\dot{\epsilon}$ értéke független a rétegződési hiba energiától. A terhelés hatására azonnali megnyúlás nem észlelhető, s a kúszási görbe szinte azonnal stacionáriussá válik, bár néhány esetben észlelhető primer, illetve inverz primer szakasz is. A kúszási alakváltozás során általában szubszerkezet kifejlődése nem tapasztalható. Az I. típusú szilárd oldatokra jellemző $\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}(\epsilon)$ görbe a 3a ábrán látható.

A fenti jellegzetességek arra utalnak, hogy az I. típusú szilárd oldatokban a kúszást a diszlokációk viszkózus csúszása szabja meg [22]. Az oldott atomok által a diszlokációkra kifejtett erő ezekben az ötvözetekben összemérhető a diszlokáció kölcsönhatásból származó erővel, így a diszlokációs keményedés létrejötté nem nyilvánvaló. Közvetve azonban beláthatjuk, hogy az I. típusú szilárd oldatokban is kell, hogy működjenek keményedési mechanizmusok. Amennyiben ugyanis ilyenek nem léteznek, a diszlokációsokszorozódás a nyúlási sebesség folyamatos növekedéséhez vezetne, tehát a kúszási görbének nem létezne stacionárius szakasza. Mivel a nyúlási sebesség csak kicsiny megnyúlások esetén növekedik, s igen nagy megnyúlástartományban állandó, arra következtethetünk, hogy az alakváltozás során vagy a diszlokációsúszás sebességét csökkentő belső feszültségek alakulnak ki, vagy a mozgásképes diszlokációsűrűség csökken jelentős mértékben.

2.3. II. típusú szilárd oldatok

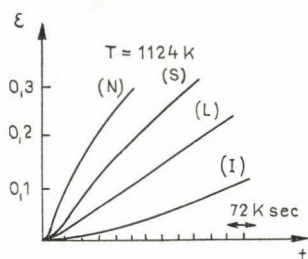
A tiszta fémek és az első típusú szilárd oldatok két lényegesen különböző kúszási viselkedést reprezentálnak. A tiszta fémekben a kúszást a szubszerkezet kifejlődésén keresztül az alakítási keményedés, az I. típusú oldatokban pedig a diszlokációk viszkózus mozgása szabja meg.

A II. típusú szilárd oldatok a két határeset közötti átmenetet képviselnek. Ezekben az anyagokban a diszlokációmozgást mind az oldott atomok, mind a diszlokációk közötti kölcsönhatások jelentősen befolyásolják. Jellemző, hogy kúszási görbéjük szigmoid típusú, vagyis a kúszási sebesség először az I. típusú ötvözetekben tapasztalt viselkedéshez hasonlóan növekszik, majd a tiszta fémekre jellemző módon csökken. A 3. ábra sematikus görbéi mutatják, hogy a terhelés hatására bekövetkező diszlokációsokszorozódás és az ennek megfelelő $\dot{\epsilon}$ növekedés esetenként kísérleti úton észlelhetetlenül gyors is lehet. Az észlelési tartományban ezek az ötvözetek a tiszta fémekhez hasonlóan keményednek. Amennyiben az oldott atomok és a diszlokációk között erős kölcsönhatás van, az $\dot{\epsilon}(\epsilon)$ görbe gyorsuló szakasza is észlelhető.

A II. típusú ötvözetekre általánosan jellemző, hogy a stacionárius szakaszt leíró (1) összefüggésben a feszültség kitevője 5 és $\dot{\epsilon}$ függ a rétegződési hiba energiától. A terhelés hatására gyakran észlelhető pillanatszerű megnyúlás és a primer szakaszban szabályos szubszerkezet fejlődik ki.

2.4. Átmenet az I. és II. típusú viselkedés között

Sherby és Burke eredetileg az ötvözeteket sorolta két osztályba kúszási tulajdonságaik szerint [11]. Később azonban kiderült, hogy itt nem anyagi tulajdonságról van szó, hanem jellegzetes viselkedéstípusról, s a körülményektől függően ugyanaz az ötvözet I., illetve II. típusú viselkedést is mutathat. Az ón és indium ötvözetek pl. az oldott koncentráció növekedtével a II. típusú viselkedésből az I. típusúra váltanak át [23]. Az Al—3 at% Mg ötvözet pedig a külső feszültségnek egy kritikus érték alá csökkenésekor hirtelen I—II. átmenetet mutatnak [24]. A kérdéssel Langdon és munkatársai foglalkoztak részletesen [12, 13].



7. ábra. Fe—1,5 Mo ötvözet különböző kúszási görbéi

Hasonló megállapításra jutott Karashima is [16], aki az átmeneti viselkedés különböző lehetőségei miatt az osztálybasorolás finomítását javasolja. A kísérleti tapasztalatok szerint ugyanis az I. típusú ötvözetek kúszási görbéje igen különböző lehet. A 7. ábra Fe—1,5 at% Mo ötvözet különböző típusú kúszási görbéit mutatja a kúszási feszültség csökkenésével [25]. Látható, hogy a tiszta fémekre jellemző normál (N) tranziens mellett szigmoid (S), lineáris (L) és inverz (I) kúszási görbe is megjelenik. A mikroszerkezeti vizsgálatok azt mutatják, hogy az Fe—Mo ötvözetekben annak ellenére, hogy az alakváltozást a diszlokációk viszkózus mozgása irányítja, cellaképződés is megfigyelhető. Karashima ez utóbbi ötvözettypust I.a. osztálynak nevezi.

2.5. A belső feszültség szerepe

A tiszta fémekben és a II. típusú szilárd oldatokban a szubszerkezet domináns szerepet játszik a kúszási alakváltozásban. A cellás szerkezet kifejlődése jellegzetesen heterogén teszi ezeknek az anyagoknak a szubszerkezetét. A szerkezet heterogenitása miatt a feszültség az anyagban inhomogén válik. Az inhomogenitás következtében kúszási anelaszticitás lép fel és a szubszemcsemérettel összemérhető hullámhosszú hosszútávú belső feszültségek keletkeznek [26]. Ily módon a kúszási alakváltozást ezekben az anyagokban a

$$\sigma_e = \sigma_a - \sigma_i$$

effektív feszültség határozza meg, ahol σ_a a külső feszültség. A kísérleti tapasztalatok szerint [26—28] a tiszta fémekben és a II. típusú ötvözetekben $\frac{\sigma_i}{\sigma_a} \sim 1$ azaz a belső feszültség összemérhető a külső feszültséggel.

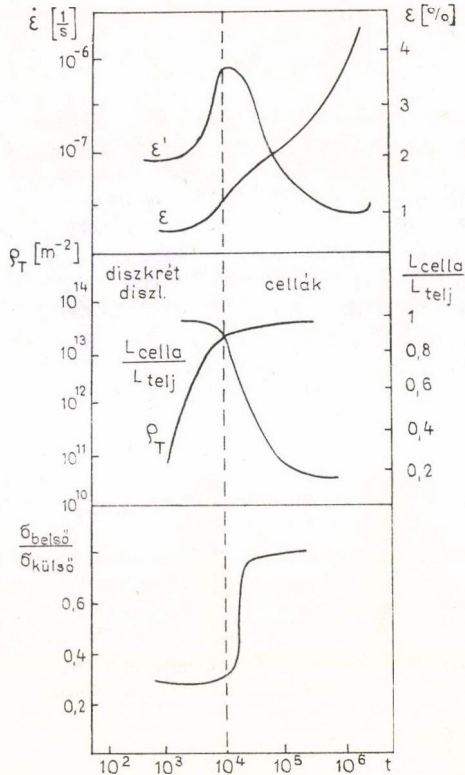
A belső feszültségek eredetét illetően többféle elképzelés is felmerült [16], a kísérleti tapasztalatok [18, 26, 29] és elméleti megfontolások [14, 16] azonban arra utalnak, hogy a tiszta fémekben és a II. típusú szilárd oldatokban a belső feszültség a szubszerkezet következménye.

Ezt igazolja, hogy az anelasztikus visszafolyás kinetikája polikristályokban és egykristályos anyagokban hasonló [26], valamint hogy a szubszerkezet kifejlődésével a belső feszültség ugrásszerűen nő. A 8. ábrán Cu—16 at% Al ötvözet kúszási sebes-

ségének, belső feszültségének és diszlokációsűrűségének időbeli változása látható [16, 18]. Az ábra mutatja, hogy az alakváltozás kezdetén a diszlokációeloszlás homogén, és $\dot{\epsilon}$ növekedésével a diszlokációsűrűség is nő. A cellás szerkezet az alakváltozási sebesség csökkenésével egy időben kezd kifejlődni, ugyanakkor a cellák belsejében levő, mozgásképesnek tekinthető diszlokációk sűrűsége csökken. Látható továbbá, hogy a belső feszültség a cellaszerkezet kifejlődésével ugrásszerűen nő.

Ismeretes, hogy a szubhatárok általában stabil diszlokációkötegekből állnak, s ezeknek a hosszútávú feszültségtére általában kicsiny. *Caillard* és *Martin* Al kúszása során végzett mikroszerkezeti vizsgálatai ezt alátámasztják [30, 31]. Megállapításuk szerint az általuk vizsgált szubhatárokat jó közelítéssel teljesül a Frank formula, így a határ hosszútávú feszültségtére valóban nem lehet túlságosan nagy. Becslésük szerint azonban így is elérheti a külső feszültség felét, amit tovább növelhetnek a szubszerkezet hibái.

Belső feszültségek az I. típusú szilárd oldatokban is fellépnek, általában azonban kicsinyek a külső feszültséghez képest [16, 32].



8. ábra. A kúszás különböző paramétereinek időfüggése Cu—16 at% Al ötvözetben

3. A DISZLOKÁCIÓS KÚSZÁSRA VONATKOZÓ ELMÉLETEK

Ebben a fejezetben röviden áttekintjük a diszlokációs kúszást leíró modelleket. Mielőtt a mikroszerkezeti modellek tárgyalására térnénk, előrebocsátunk néhány általános összefüggést és fenomenológikus megfontolást.

A kúszás stacionárius szakaszán $\dot{\epsilon}$ a külső feszültség és a hőmérséklet mellett a belső szerkezettől is függ, azaz

$$\dot{\epsilon} = f(S_i, \sigma, T) \quad (7)$$

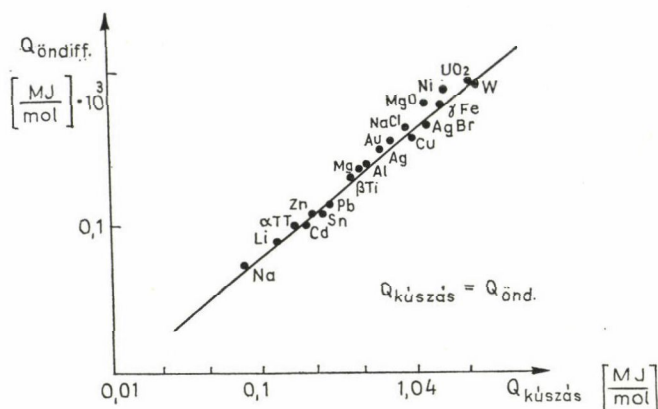
ahol S_i a szerkezetet jellemző paraméter (esetleg paraméterek). A különböző elméletekben S_i leggyakrabban a diszlokációsűrűséget, vagy az átlagos belső feszültséget jelenti [20]. A szerkezet, s így az S_i szerkezeti paraméter is, a megújulás és az alakítási keményedés miatt az idő, illetve a megnyúlás függvénye. Így a stacionárius mikroszerkezet kialakulásának feltétele a

$$dS_i = \left(\frac{\partial S_i}{\partial t} \right)_\epsilon dt + \left(\frac{\partial S_i}{\partial \epsilon} \right)_t d\epsilon = 0 \quad (8)$$

alakban írható fel, amiből

$$\dot{\varepsilon} = - \frac{\left(\frac{\partial S_i}{\partial t} \right)_\varepsilon}{\left(\frac{\partial S_i}{\partial \varepsilon} \right)_t} \quad (9)$$

adódik. A stacionárius kúszás és az időben állandó mikroszerkezet létezéséhez tehát az szükséges, hogy (7) és (9) egyszerre teljesüljön. Bár a kúszás során lejátszódó folyamatok igen bonyolultak lehetnek, a kísérleti tapasztalat azt mutatja, hogy a magas-hőmérsékleti kúszás aktiválási energiája széles tartományban megegyezik az öndiffúzió aktiválási energiájával (9. ábra), [14]. Ez arra utal, hogy a stacionárius kúszást egyszerű termikusan aktivált mikrofolyamat irányítja. Ennek következtében az alábbi két határesetet kell figyelembe vennünk.



9. ábra. A kúszás és az öndiffúzió aktiválási energiája közötti összefüggés

1. Az öndiffúzió csak a megújulási folyamatot szabályozza, maga a deformáció független a hőmérséklettől. Ekkor (7) az $f(S_i, \sigma) = 0$ alakra egyszerűsödik, s így

$$\dot{\varepsilon} = - \frac{\left(\frac{\partial S_i}{\partial t} \right)_\varepsilon}{\left(\frac{\partial S_i}{\partial \varepsilon} \right)_t} = - \frac{\left(\frac{\partial \sigma}{\partial t} \right)_\varepsilon \frac{dS_i}{d\sigma}}{\left(\frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon} \right)_t \frac{dS_i}{d\sigma}} \quad (10)$$

vagyis

$$\dot{\varepsilon} = - \frac{\left(\frac{\partial \sigma}{\partial t} \right)_\varepsilon}{\left(\frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon} \right)_t} \quad (11)$$

A szokásos jelölésekkel tehát (10) az

$$\dot{\varepsilon} = - \frac{r}{h} \quad (12)$$

Bailey—Orowán egyenletbe megy át, ahol $r = \left(\frac{\partial \sigma}{\partial t}\right)_\varepsilon$ a megújulási sebesség, $h = \left(\frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon}\right)_t$ az alakítási keményedési együttható [1].

A másik határesetben adott σ esetén $S_i \dot{\varepsilon}$ értékétől függetlenül csak az ε megnyúlás függvénye. Ebben az esetben a (8) egyenlet nem érvényes. Ilyenkor a kúszást a diszlokációcsúszás szabja meg [20].

A fenti folyamatokat megújulással (recovery controlled), illetve csúszással (glide controlled) szabályozott kúszásnak nevezzük.

A kúszási modellek többsége a (7), illetve (10) fenomenologikus egyenletek konkrét alakjának mikroszkopikus, általában diszlokációmozgásra alapozott mechanizmusokból történő meghatározásán alapul.

A kúszási sebesség meghatározására többnyire az

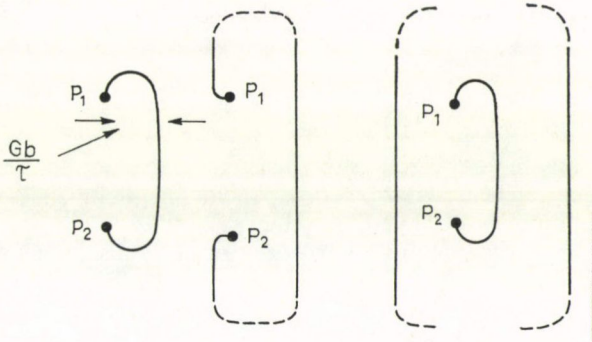
$$\dot{\varepsilon} = \varrho(t) b v \quad (13)$$

összefüggést használjuk, ahol ϱ a mozgásképes diszlokációsűrűség, v a diszlokációk sebessége, b a Burgers-vektor.

A stacionárius szubszerkezet a kúszási alakváltozás során úgy marad fenn, hogy a diszlokáció sokszorozódás és megsemmisülés éppen egyensúlyt tart. Az alakváltozást ebben az esetben is a mozgó diszlokációk okozzák, azonban a mozgó diszlokációsűrűséget éppen a forrásokból időegységenként kilépő diszlokációk száma szabja meg, azaz ebben az esetben célszerűbb a megnyúlási sebéséget az

$$\dot{\varepsilon} \sim \dot{N} \Phi b \quad (14)$$

alakban kifejezni, ahol N az egységnyi térfogatban keletkező diszlokációhurok száma, Φ pedig az egyetlen hurok által súrolt felület.



10. ábra. A diszlokációsokszorozódás mechanizmusa

3.1. Az I. típusú szilárd oldatokra vonatkozó elméletek

Megállapítottuk, hogy az I. típusú ötvözetekben a diszlokációk mozgását a diszlokáció körül kialakuló szennyezőatmoszféra határozza meg. A különböző mikrokúszási mechanizmusokat részletesen ismerteti a [14] dolgozat. A mikromechanizmustól függetlenül a diszlokációsebesség a

$$\sigma b - A v = 0 \quad (15)$$

mozgásegyenletből fejezhető ki, ahol σ a külső feszültség, A pedig a viszkózus erőt megszabó, a hőmérséklettől és a mikromechanizmustól függő állandó. (13)-ba beírva a (15)-ből adódó sebességértéket, valamint a (2) összefüggés $\sigma_0=0$ -ra vonatkozó speciális alakjából kifejezett $\dot{\epsilon} = \frac{\sigma^2}{\alpha^2 G^2 b^2}$ diszlokációsűrűséget, a kúszási sebességre

$$\dot{\epsilon} \simeq \frac{\sigma^3}{\alpha^2 A G^2} \quad (16)$$

adódik. A *Weertman* gondolatmenetére épülő egyszerű modell jól visszaköszön a kísérleti úton megállapított $\dot{\epsilon} \sim \sigma^3$ kapcsolatot.

Weertman egy másik, diszlokáció halmazok csúszó mozgásán alapuló bonyolultabb modellből is lényegében hasonló eredményre jutott [33].

Újabban *Takeuchi* és *Argon* dolgozott ki a diszlokációk viszkózus mozgásán alapuló kúszási modellt [34]. Modelljüket a következő feltevésekre alapozták:

1. Az alakváltozást a lassabban mozgó éldiszlokációk irányítják.
2. Polygonizáció nem történhet, mert a szabad diszlokációmozgás éppen olyan lassú, mint a kölcsönható diszlokációk megújulása. Így szubszerkezet nem alakulhat ki.

3. A diszlokáció felhalmozódások nem stabilak, mert a csúszó síkjából kimozduló diszlokáció kúszó mozgása gyorsul. Az egyező előjelű éldiszlokációk elhelyezkedésüktől függetlenül mindig taszítják egymást, ezért a diszlokációeloszlás homogénizálódik.

4. A diszlokációmozgás nem korlátozódik a csúszósíkra, így a diszlokáció sokszorozódás miatt fellépő véletlen belső feszültségek az éldiszlokációkon sűrűn elhelyezkedő lépcsőket keltenek.

A stacionárius kúszás sebessége az éldiszlokációk keletkezési és megsemmisülési sebességének egyenlőségéből határozható meg. A modellben diszlokációforrásként az éldiszlokációk szuperlépcsői szerepelnek. A forrádiszlokáció $\lambda = \frac{Gb}{\tau}$ távolságra történő kúszása után a keletkezett csavardiszlokáció gyorsan kiterjed, s a forrádiszlokáció eredeti helyzetébe tér vissza. A diszlokációk megsemmisülése az ellentétes előjelű él és csavarkomponensek egyesülésével megy végbe.

Egyszerű geometriai megfontolások szerint az éldiszlokációk keletkezésének sebessége

$$\dot{\rho}_e^+ = 4l_s \rho_e N \dot{n} \quad (17)$$

a megsemmisülési sebesség pedig

$$\dot{\rho}_e^- = k_2 \rho_e^2 v_f \lambda, \quad (18)$$

ahol l_s a csavardiszlokációk szabad úthossza, ρ_e az éldiszlokációsűrűség, N az egységnyi hosszra jutó lépcsők száma, $\dot{n} = k_1 \frac{v_f}{\lambda}$ a forrás sokszorozódási sebesség, v_f a szabad csúszás sebessége, k_1 és k_2 állandók. Ebből a

$$\dot{\rho}_e^+ = \dot{\rho}_e^- \quad (19)$$

feltétellel a stacionárius diszlokációsűrűsége

$$\varrho_e \sim \frac{1}{\lambda^2} \quad (20)$$

adódik.

A kúszási sebesség meghatározásakor a diszlokációmozgás mellett a diszlokációsokszorozódást is figyelembe kell venni. Így (13) és (14) kombinációjából

$$\dot{\varepsilon}_s = \frac{1}{2} \left[b\bar{v}\varrho_e + \frac{1}{2} b\dot{\varrho}_e^+ \lambda \right] \quad (21)$$

adódik. Mivel $\bar{v} \sim v_f$, (21)-ből azt kapjuk, hogy

$$\dot{\varepsilon}_s \simeq \frac{1}{2} \left[\frac{bv_f}{\lambda^2} + \frac{bk_1 v_f}{\lambda^2} \right] \simeq \frac{G}{A} \left(\frac{\tau}{G} \right)^3, \quad (22)$$

ahol A a (15) egyenletben szereplő viszkozitási állandó értéke, ha a diszlokációra ható erőt szennyező atmoszféra fejt ki. Mivel a τ csúsztatófeszültség arányos a σ húzófeszültséggel, a modell jól tükrözi a kísérletileg kapott $\dot{\varepsilon} \sim \sigma^3$ összefüggést. A modell értékét növeli, hogy nem tartalmaz olyan paramétereket, amelyeket a kísérleti adatokhoz kell illeszteni.

3.2. Tiszta fémekre és II. típusú ötvözetekre vonatkozó elméletek

Ez a problémakör elméletileg még nagyon tisztázatlan. Igen sokféle modell ismeretes, általánosan érvényes eredmények azonban még nem születtek. Példaként *Weertman* diszlokáció kúszáson alapuló modelljeivel a megújulási modellekkel és *Argon* szubhatár kihajlási elképzelésével foglalkozunk.

a) A *Weertman* modell [22]

Weertman elképzelése szerint a kúszást irányító folyamat a diszlokációkúszás. A stacionárius kúszás során mint már említettük, a diszlokációkeletkezés és megsemmisülés éppen kiegyenlíti egymást. A diszlokációk úgy semmisülnek meg, hogy a különböző csúszási síkokon mozgó ellenkező előjelű diszlokációk egymás közelébe érve kúszó mozgással egyesülnek. A kúszó mozgás közben egyes diszlokációk vakanciákat bocsátanak ki, mások pedig vakanciákat nyelnek el. A stacionárius szakaszban ez a két folyamat is kiegyenlíti egymást, s a diffúzió éppen az így létrejövő vakanciaáram útján kontrollálja a diszlokációkúszást. A kúszási sebesség (13) alapján határozható meg a diszlokációsűrűség és a diszlokációsebesség ismeretében. Tegyük fel, hogy a diszlokációk teljes élettartamuk alatt L távolságot tesznek meg csúszósíkjukban, és d távolságot kúszó mozgással. A kúszás v_c sebességével az alakváltozást megszabó diszlokációcsúszás sebessége a

$$v = v_c \frac{L}{d} \quad (23)$$

alakban írható fel. A kúszás sebessége a vakanciadiffúzió egyenletéből határozható meg. A diffúziós egyenlet felírásához a megsemmisülő diszlokációk mentén kell ismernünk a vakanciakonzentrációt.

A külső feszültség egységnyi diszlokációs szakaszon σbL munkát végez, ugyanakkor az egységnyi diszlokációs szakasz megsemmisülésekor $\frac{d}{b^2}$ számú vakancia keletkezik, illetve semmisül meg. Az egy vakanciára jutó energiabefektetés tehát $\frac{\sigma b^3 L}{d}$. Ennek megfelelően a megsemmisülő diszlokációpár tagjai mentén a vakanciakonzentráció

$$C_1 = n'_0 e^{-\frac{Q - \frac{\sigma b^3 L}{d}}{kT}} \quad (24)$$

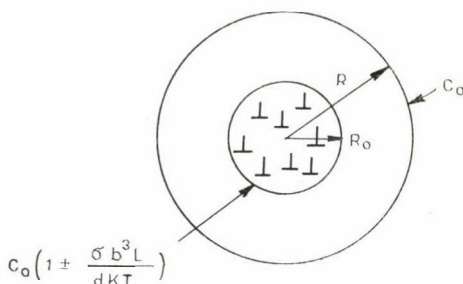
illetve

$$C_2 = n'_0 e^{-\frac{Q + \frac{\sigma b^3 L}{d}}{kT}} \quad (25)$$

-re változik, ahol $n'_0 = n_0 e^{\frac{S_c}{k}}$, ahol S_c a vakancia keletkezés entrópiája. A diszlokációkúszás sebességét a

$$C_1 - C_2 = \Delta c = n'_0 e^{-\frac{Q}{kT}} \left[e^{\frac{\sigma b^3 L}{kT}} - e^{-\frac{\sigma b^3 L}{kT}} \right] \quad (26)$$

koncentrációkülönbség miatt meginduló vakanciaáram határozza meg. A vakanciaáram sebessége azonban csak a konkrét diszlokációelrendeződés ismeretében számítható ki. Az egyszerűség kedvéért tételezzük fel, hogy a diszlokációk N azonos előjelű diszlokációból álló csoportja mozog azonos irányban (11. ábra). Legyen R_0 annak a környezetnek a sugara, amelyben a vakancia koncentráció



$$C_V = C_0 e^{\mp \frac{\sigma b^3 L}{kT}} \quad (27)$$

ami kis feszültség esetén a

$$C_V = C_0 \left(1 \pm \frac{\sigma b^3 L}{kT} \right) \quad (28)$$

összefüggéssel közelíthető, és tegyük fel, hogy R távolságban a koncentráció már a C_0 átlagos érték. Ekkor a vakanciaáram

$$I = \frac{2\pi D C_0 \frac{\sigma b^3 L}{kT}}{\ln R/R_0} \quad (29)$$

amiből a diszlokáció kúszási sebességre

$$v_f = 2\pi D C_0 \frac{\sigma b^3 L}{N k T \ln R/R_0} \sim \frac{D C_0 \sigma b^5 L}{N d k T}$$

a kúszási sebességre pedig (13) és (23) alapján

$$\dot{\epsilon} \sim \frac{4\pi^2 \sigma^3 b^4 L^2 D c_0}{G^2 k T d^2 N} \quad (30)$$

adódik. A kúszási sebességre kapott egyenlet szerint az öndiffúzió és a kúszás aktiválási energiája megegyezik, hiszen

$$\dot{\epsilon} \sim D c_0 \sim e^{-\frac{Q}{kT}} \quad (31)$$

ahol D az öndiffúziós együttható, Q pedig a diffúzió aktiválási energiája. A kúszási sebesség és a feszültség közötti összefüggést (30) csak közvetett módon tartalmazza, mivel ebben a formulában még d , L és N is a feszültség függvénye lehet. A diszlokációhurkok felhalmozódásakor $N \sim \frac{\sigma L}{Gb}$, az átlagos kúszási távolság pedig $d \sim \frac{Gb}{\sigma}$.

Feltéve, hogy a diszlokációforrások száma független az alkalmazott feszültségtől és minden forrás L sugarú hurkokat bocsát ki, akkor átlagosan $\pi L^2 d$ térfogat tartalmaz egy forrást, azaz $L^2 \sim \frac{1}{d}$. Felhasználva a fenti becsléseket (30)-ból $\dot{\epsilon} \sim \sigma^{4.5}$ adódik.

b) A szubhatár kihajlási modell

Argon és Takeuchi a szubszerkezet képződéssel járó kúszási folyamatokat a szubhatár kihajlásokból származó belső feszültségek alapján értelmezi [35]. A kúszási sebesség meghatározására lényegében a [34]-ben kidolgozott módszert használják. A stacionárius szakaszban a mobilis diszlokációsűrűség dinamikus egyensúlyából (19) határozzák meg a diszlokációsűrűséget. Caillard és Martin „in situ” vizsgálatai [30, 31, 37] szerint a diszlokációk a szubhatárokból levő forrásokban képződnek adott „várakozási idő” elteltével. A várakozási idő a forrás-diszlokáció kúszó mozgásával kapcsolatos. A mozgásképesse váló diszlokációk ezután a szubszemcseméret nagyságrendjébe eső l távolságot csúszó mozgással tesznek meg, majd más csúszó diszlokációkat w távolságra megközelítve kúszó mozgással megsemmisülnek. Az annihiláció általában a szubhatárok közelében t_a várakozási idő után következik be. Mint-hogy t_a jó közelítéssel megegyezik a diszlokáció teljes élettartamával, az átlagos csúszási sebesség a

$$\bar{v} = \frac{l}{t_a} \quad (32)$$

összefüggéssel közelíthető. A kiterjedt éldiszlokációk kúszási sebessége egy merev gömb modell alapján [38]

$$v_c = v_0 \left(\frac{\sigma}{G} \right), \quad (33)$$

ahol

$$v_0 = 2 \left(\frac{24\pi(1-\nu)}{2+\nu} \right)^2 \left(\frac{D}{b} \right) \left(\frac{G\Omega}{kT} \right) C_j \left(\frac{\Gamma}{Gb} \right)^2. \quad (34)$$

Itt C_j az egységnyi diszlokációs szakaszra jutó lépcsők koncentrációja, D a diffúziós állandó, Ω az atomtérfogat, Γ a rétegződési hiba energia. A többi betűk jelentése a szokásos.

A diszlokáció keletkezés sebessége ekkor

$$\dot{\varrho}_m^+ = \frac{2N}{t_n} = \frac{2Nv_0}{\lambda} \left(\frac{\sigma}{G} \right) = \frac{2Nv_0}{\beta b} \left(\frac{\sigma}{G} \right)^2, \quad (35)$$

ahol t_n a diszlokációkeltés várakozási ideje, $\lambda = \beta \frac{Gb}{\sigma}$ a keletkezéskor befutott kúszási távolság, N a forrássűrűség, $\beta \sim 0,1$. A megsemmisülés sebessége

$$\dot{\varrho}_m^- = -\frac{\varrho_m}{t_a} = -\frac{2v_0 b \varrho_m}{\pi(1-\nu)w^2} = -\frac{2v_0 b}{\pi(1-\nu)} \left(\frac{l}{w} \right) \varrho_m^2, \quad (36)$$

ahol $t_a = \frac{\pi(1-\nu)}{2bv_0} w^2$ az annihilációs idő, a ϱ_m diszlokációs sűrűséget pedig az l csúszási és w annihilációs távolsággal a

$$\varrho_m = \frac{1}{wl} \quad (37)$$

alakban fejeztük ki. Figyelembe kell venni továbbá, hogy minél inkább kiszélesedett egy diszlokáció, annál kevésbé valószínű, hogy forrásként működjön. Így

$$N \sim \varrho_m \frac{b}{x}, \quad (38)$$

ahol $x = \frac{2+\nu}{24\pi(1-\nu)} \frac{Gb}{\Gamma}$ a rétegződési hiba szélessége.

A fentiek alapján a diszlokációs sűrűségre

$$\varrho_m = \frac{24\pi^2(1-\nu)^2}{(2+\nu)\beta} \left(\frac{w}{l} \right) \left(\frac{\sigma}{G} \right)^2 \left(\frac{\Gamma}{Gb} \right) \quad (39)$$

s ebből, valamint (13) felhasználásával a kúszási sebességre a lényegében (1)-gyel megegyező

$$\dot{\varepsilon} = A \left(\frac{Gb}{kT} \right) \left(\frac{D}{b^2} \right) \left(\frac{\sigma}{G} \right)^3 \left(\frac{\Gamma}{Gb} \right)^3 \quad (40)$$

összefüggés adódik.

Ebből a kísérleti eredményekkel jól egyező eredményt akkor kaphatunk, ha σ helyére a (6) effektív feszültséget írjuk be. A belső feszültségek a szerzők szerint a szemcsehatár kihajlásból erednek. Bár a tökéletes határok hosszútávú feszültségtérrel nem rendelkeznek, már a határ síkjának enyhe elfordulása hatására — geometriai okból — hosszútávú feszültségek fejlődnek ki. A belső feszültség a szubszemcse méretre átlagolt feszültséggel azonosítható. Egy egyszerű, hatszögletű szemcseoldalakat feltételező modell alapján a feszültség és a szubszemcse méret közötti $\sigma = K \left(\frac{Gb}{d} \right)$

[39] összefüggés, valamint *Vreeland* [40] szubhatár kihajlásra vonatkozó eredményeinek felhasználásával a

$$\sigma_i = KG\alpha \frac{1-\nu}{\pi} \Theta \left(\frac{\sigma}{KG\Theta} \right)^{2/3} \quad (41)$$

összefüggés határozható meg, ahol Θ a határ szöge, α és K állandók. Ezzel a kúszási sebesség az

$$\dot{\epsilon} = A \left(\frac{G\Omega}{kT} \right) \left(\frac{\Gamma}{Gb} \right)^3 \left(\frac{D}{b^2} \right) \left[\frac{\sigma}{G} - \frac{\alpha(1-\nu)}{\pi} K\Theta^{1/3} \left(\frac{\sigma}{G} \right)^{2/3} \right] \quad (42)$$

alakot ölti. Az egyenlet ebben a formájában nem adja vissza a kísérletekből adódó $n \sim 5$ kitevőt. Amennyiben azonban formálisan a (42) egyenletből meghatározzuk az

$$n = \frac{d \ln \dot{\epsilon}}{d \ln \sigma}$$

értéket, akkor az

$$n = 3 \frac{\frac{\sigma}{G} - \frac{2}{3} \frac{\sigma_i}{G}}{\frac{\sigma}{G} - \frac{\sigma_i}{G}} \quad (43)$$

formulához jutunk, ami a szokásos kísérleti tartományban ~ 5 . Az igen tetszetős modellel kapcsolatban meg kell jegyeznünk, hogy a feltételezett mértékű határkihajlást a kísérletek nem igazolják [30, 31].

4. ÖSSZEFOGLALÁS

Röviden áttekintettük az egyfázisú anyagok kúszásának mikroszerkezeti vonatkozásait. A kísérleti vizsgálatok szerint a tiszta anyagok és egyes szilárd oldatok kúszása erősen eltér. Ennek az az oka, hogy a tiszta anyagokban szubszerkezet fejlődik ki. A kísérleti tapasztalatok értelmezésére számos diszlokációs elmélet született. A feltételezett mikrofolyamatok léte általában kísérletileg csak kevésbé alátámasztott. Sokszor igen különböző mikromechanizmusok is tendenciájában azonos eredményre vezetnek. Ezért a feltételezett mikrofolyamatok létezése megnyugtatóan csak elektronmikroszkópos vizsgálatokkal dönthető el. Az elméleti modellek ismertetésekor természetesen nem törekedhettünk teljességre. Igyekeztünk azonban a legjellemzőbb módszereket illusztrálni.

IRODALOM

1. Brájer L., Kovács I. és Tasnádi P., *Magy. Fiz. Foly.* 23, 441, 1975.
2. Lendvai J., *Magy. Fiz. Foly.* 28, 37, 1980.
3. M. F. Ashby, *Acta Met.* 20, 887, 1972.
4. M. F. Ashby and H. J. Frost, in *Constitutive Equations in Plasticity*, ed. A. S. Argon, p. 117. MIT Press, Cambridge, 1975.
5. T. G. Langdon and F. A. Mohamed, *Mater Sci. Engng.* 32, 103, 1978.
6. T. G. Langdon, *Metals Forum*, 1, 59, 1978.
7. H. Lüthy, R. A. White and O. D. Sherby, *Mater Sci. Engng.* 39, 211, 1979.
8. H. Oikawa, *Mater. Sci. Engng.* 45, 211, 1980.
9. T. G. Langdon, *Met. Forum*, 1, 59, 1978.
10. J. E. Bird, A. K. Mukherjee and J. E. Dorn, in *Quantitative Relation Between Properties and Microstructure*, Ed. D. G. Brandon and A. Rosen, Israel Univ. Press p. 255. 1969.

11. O. D. Sherby and P. M. Burke, *Prog. Mater. Sci.* 13, 323, 1966.
12. F. A. Mohamed and T. G. Langdon, *Acta Met.* 22, 779, 1974.
13. P. Yavari, F. A. Mohamed and T. G. Langdon, *Acta Met.* 29, 1495, 1981.
14. W. D. Nix and B. Ilshner, in *Strength of Metals and Alloys*, Eds. P. Haasen, E. Gerold and G. Kostorz p. 1503, Pergamon Press, 1979.
15. T. Vreeland, in: *Dislocation Dynamics*, Eds. A. R. Rosenfield, G. T. Hahn, A. L. Bement and R. I. Jaffee p. 529. McGraw-Hill. New York 1968.
16. S. Karashima, in *Creep and Fracture of Eng. Mater and Structures* eds. D. Wilshire and D. R. J. Owen p. 31. Pineridge Press, 1981.
17. T. Hasegawa, S. Karashima and R. Hasegawa, *Met. Trans.* 2, 1449, 1971.
18. T. Hasegawa, S. Karashima and Y. Ikeuchi, *Acta Met.* 21, 887, 1973.
19. A. H. Clauer, B. A. Wilcox and J. P. Hirth, *Acta Met.* 18, 381, 1970.
20. S. Takeuchi and A. S. Argon, *J. Mater. Sci.* 11, 1542, 1976.
21. Tasnádi P. és Rajkovits Zs., *Magy. Fiz. Foly.* 29, 235, 1981.
22. J. Weertmann and J. R. Weertmann, *Physical Metallurgy* Ed. J. W. Cahn p. 983 North-Holland Publ. Co. Amsterdam, 1970.
23. J. Weertmann, *Trans. Am. Inst. Min. Engrs.* 218, 207, 1960.
24. K. L. Murty, F. A. Mohamed and J. E. Dorn, *Acta Met.* 20, 1009, 1972.
25. H. Oikawa, N. Kuriyama, D. Mizukoshi and S. Karashima, *Mater. Sci. Engng.* 29, 131, 1977.
26. J. C. Gibeling and W. D. Nix, *Acta Met.* 29, 1769, 1981.
27. H. Oikawa, K. Ichihashi and S. Karashima, *Scripta Met.* 10, 143, 1973.
28. A. Orlova and J. Cadek, *Phil. Mag.* 28, 891, 1973.
29. T. Hasegawa, Y. Ikeuchi and S. Karashima, *Mat. Sci. J.* 6, 78, 1972.
30. D. Caillard and J. Martin, *Acta Met.* 30, 437, 1982.
31. D. Caillard and J. L. Martin, *Acta Met.* 30, 798, 1982.
32. J. Weertman, *Acta Met.* 25, 1393, 1977.
33. J. Weertman, *J. Appl. Phys.* 28, 1185, 1957.
34. S. Takeuchi and A. S. Argon, *Acta Met.* 24, 883, 1976.
35. A. S. Argon and S. Takeuchi, *Acta Met.* 29, 1877, 1981.
36. A. S. Argon, F. Prinz and W. C. Moffatt, in *Creep and Fracture of Engng. Mater and Struct* p.1. Eds. D. Wilshire and D. R. J. Owen, Pineridge Press, Swansea, 1981.
37. D. Caillard and J. L. Martin, *ibid* p. 17.
38. A. S. Argon and W. C. Moffatt, *Acta Met.* 29, 293, 1981.
39. Rajkovits Zs.—Tasnádi P. *Magy. Fiz. Foly.* 29, 255, 1981.
40. Vreeland, *Acta Met.* 7, 240, 1959.

8. A PORTEVIN—LE CHATELIER EFFEKTUS

BÉRCES GYÖRGY

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOM

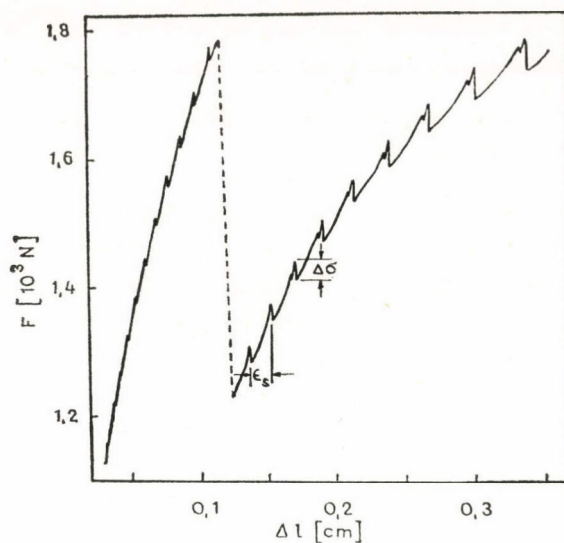
1. Bevezetés	481
2. Ponthibák diszlokációk terében	486
2.1. Diszlokációk és ponthibák kölcsönhatása	486
2.2. Szennyező atmoszféra kialakulása nyugvó diszlokáció körül	487
2.3. Szennyező atmoszféra mozgó diszlokáció körül	490
3. A PLE értelmezése a szennyezőknek a diszlokációmozgásra kifejtett fékező hatása alapján	494
4. A PLE-vel kapcsolatos kísérleti eredmények, és értelmezésük	498
4.1. A Cottrell-modell	498
4.2. A Mc Cormick-modell	502
4.3. Lüders-sáv analízis	503
4.4. Néhány további módszer és eredmény	505
5. Összefoglalás	506
6. Irodalomjegyzék	507

1. BEVEZETÉS

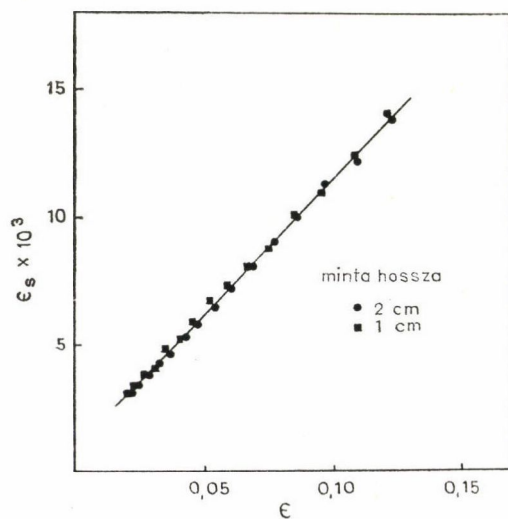
Több mint hatvan éve már annak, hogy *Portevin* és *Le Chatelier* felfigyeltek arra, hogy rezet és magnéziumot tartalmazó alumíniumötvözet feszültség-megnyúlás görbéjén egy kezdeti szakasz után fűrészfogszerű, gyakran periodikus oszcillációk jelennek meg [1]. Ezt a jelenséget azóta számos — többnyire szubsztitúciós szerkezetű — ötvözetben észlelték és az irodalomban általában *Portevin—Le Chatelier* effektusnak (PLE), „fogazott” folyásnak (serrated yielding), illetve rázkódó folyásnak (jerky flow) nevezik.

Egy ilyen, jellegzetes erő-megnyúlás görbét mutat az 1. ábra, amelyet *Mc Cormick* [2] Al—0,7% Mg—0,4% Si ötvözetben végzett mérés során kapott. A henger alakú minta átmérője kb. 5 mm, hosszúsága 20 mm volt. A mintát előzetesen 500 °C-on hőkezelték egy órán keresztül, majd szobahőmérsékletű vízbe történt befagyasztás után helyezték a szakítógépbe, ahol $\dot{\epsilon}=0,1 \text{ perc}^{-1}$ relatív nyúlási sebességgel alakították. Megfigyelhető az ábrán, hogy a fogazatok megjelenése egy kritikus ϵ_c megnyúlás után kezdődik, ezen kívül az egymás utáni fogak közötti ϵ_s távolság, valamint az egyes fogaknál fellépő $\Delta\sigma$ feszültségesés nagysága az, ami elsősorban jellemzője az ilyen típusú folyási görbének. Ezeket a viszonylag gyorsan emelkedő, majd hirtelen leeső fogakat A típusú [3], vagy reguláris, illetve zárt fogaknak nevezik.

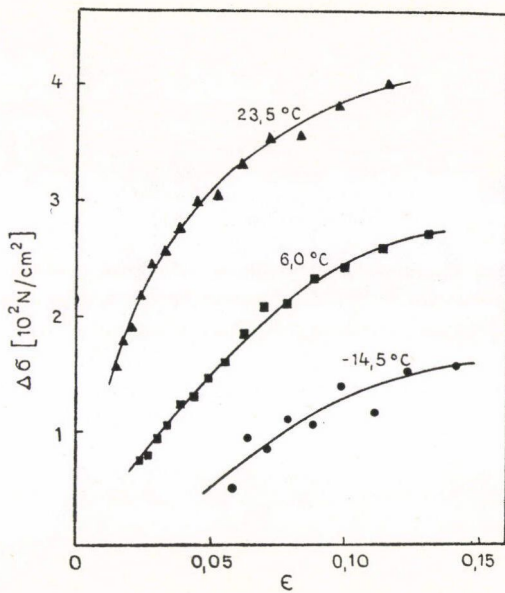
A 2. ábra ϵ_s -nek a relatív megnyúlástól való függését mutatja, amelyről leolvasható, hogy a fogak közötti távolság a deformációval lineárisan nő, míg a $\Delta\sigma$ feszültségesésnek ϵ -től való függése már eltér a lineáristól (3. ábra). Amennyiben az alkalmazott nyújtási sebesség kisebb mint $2,5 \times 10^{-3} \text{ perc}^{-1}$, az erő-megnyúlás görbe kezdeti



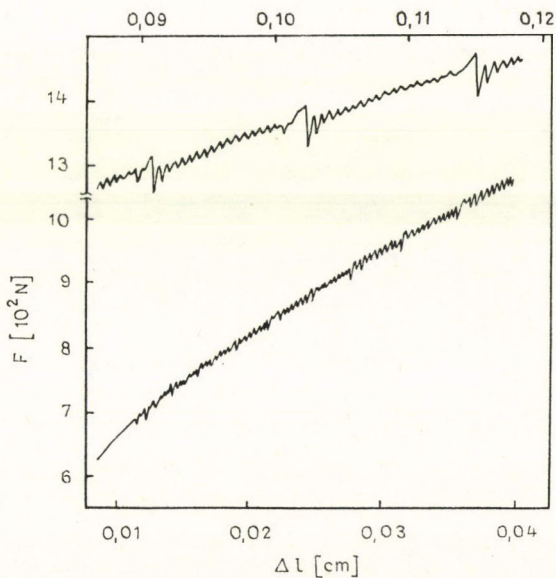
1. ábra. Al—0,7% Mg—0,4% Si ötvözet erő-megnyúlás görbéje, $\dot{\epsilon}=0,1 \text{ perc}^{-1}$ nyújtási sebesség mellett [2]



2. ábra. Az A típusú fogak közötti ϵ_s távolság változása az ϵ deformáció függvényében ($\dot{\epsilon}=0,1 \text{ perc}^{-1}$) [2]



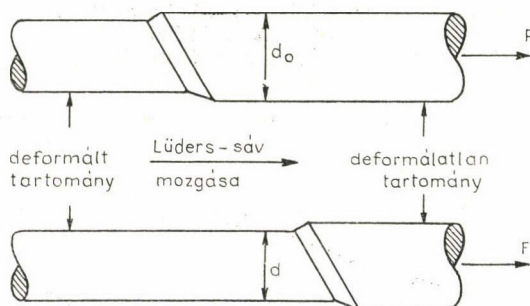
3. ábra. A megnyúlás és hőmérséklet hatása az egyes fogaknál fellépő $\Delta\sigma$ feszültségesés nagyságára [2]



4. ábra. Al—0,7% Mg—0,4% Si ötvözet erő-megnyúlás görbéje $\dot{\epsilon}=0,001$ perc⁻¹ nyújtási sebesség mellett [2]

szakasza — amint ezt a 4. ábra mutatja — teljesen szabálytalan, rázkódó jellegű, majd a deformáció növekedésével kialakul egy majdnem periodikusan ismétlődő szerkezet. Ez néhány százalékos nyújtás után következik be és jellegzetessége, hogy periodikus *A* típusú fogak jelennek meg, amelyek rárakódnak a magasabb frekvenciájú, ún. *B* típusú, vagy irreguláris fogakra. A „rázkódó” szakaszra jellemző, hogy kis megnyúlásoknál $\Delta\sigma \cong \text{áll.}$, míg növekvő ε esetén ε_s is nő.

Az *A* típusú fogak megjelenése közvetlen következménye a mintában egy adott feszültségnél keletkező ún. Lüders-sávoknak. A tapasztalat azt mutatja, hogy fémek plasztikus deformációja gyakran szakaszosan történik, kis, lokalizált képlékeny zónák (Lüders-sávok) keletkezésével, és ezeknek a próbatesten való végighaladásával. Lüders-sáv képződést többnyire azokban az anyagokban észleltek, ahol erős kölcsönhatás lép fel a szennyező atomok és diszlokációk között (pl. szén, nitrogén esetén vasban, acélban, vagy magnézium esetén alumíniumban). Ezekben a fémekben a diszlokációk mentén létrejövő szegregáció a diszlokációvonalat rögzítheti, majd amikor a kellően nagy feszültség végül kiszabadít néhány diszlokációt a környező oldott atomok atmoszférájából, ezek a diszlokációk már kisebb feszültségnél is mozgásképesek lesznek. E lokálisan kialakuló diszlokáció mozgásból létrejövő, képlékeny deformációs front a Lüders-sáv. A szakaszos Lüders-sáv keletkezéssel és terjedéssel létrejövő folyás gyakran kellemetlen és megengedhetetlen egy bonyolultabb formájú alkatrész — pl. gépkocsi ajtajának, lökhárítójának, alacsony széntartalmú acélból — gyártásakor, mert felület durvulást eredményezhet [4, 5]. Az 5. ábra sema



5. ábra. Egy sematikusan ábrázolt Lüders-sáv

tikusan mutatja egy hengeres rúdon létrejövő Lüders-sáv szerkezetét. Növekvő húzófeszültség hatására a sáv a minta egyik végétől a másik felé mozog. Ha figyelembe vesszük, hogy ezen képlékeny alakváltozás alatt a próbatest térfogata gyakorlatilag nem változik meg, az

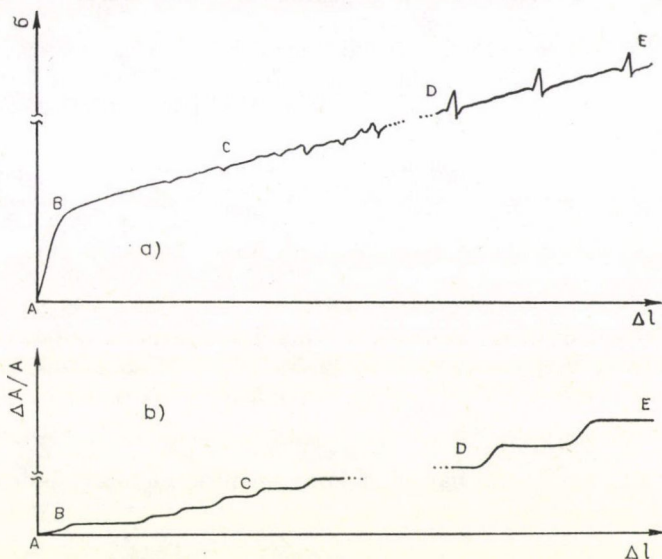
$$\varepsilon_L = \frac{l - l_0}{l_0} \quad (1)$$

Lüders megnyúlás kifejezhető az

$$\varepsilon_L = \frac{d_0^2 - d^2}{d^2} \quad (2)$$

formában is, ahol l_0 , d_0 , illetve l , d a minta hosszúsága és átmérője a kezdeti állapotban, illetve a Lüders-sáv áthaladása után.

Correia és Fortes [6, 7] a Lüders-sávok keletkezésének és eltűnésének mechanizmusát tanulmányozták egy főként vasat és magnéziumot tartalmazó alumínium-ötvözetben (Al—0,25 % Fe—0,11 % Mg—0,10 % Cu—0,08 % Si—0,02 % Zn). A rúd alakú próbatestek átmérője 3,6 mm, hosszúságuk 70 mm volt. 485—520 °C közötti oldó hőkezelések után edzették le a mintákat szobahőmérsékletű vízbe, majd néhány perctől több napig terjedő öregítés után szobahőmérsékleten $\dot{\epsilon} \approx 5 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ sebességű nyújtást alkalmaztak. A próbatesteken transzverzális extenzométereket helyeztek el, amelyek segítségével a Lüders-megnyúlásokat és a sávok haladási sebességét tudták mérni. A 6. ábra egy tipikus feszültség-megnyúlás, valamint átmérő-megnyúlás



6. ábra. Feszültség-megnyúlás görbe A típusú fogakkal (a),
mintaátmérő-megnyúlás közötti kapcsolat (b) [6]

kapcsolatot mutat ugyanazon mintára. Megfigyelhető a mintaátmérő lépcsőzetes kontrakciója és az ezzel egyidejűleg jelentkező A típusú fogak megjelenése (DE tartomány) az irreguláris CD szakasz után. A BD tartományban a minta átmérője a folytonos csökkenés mellett néha ugrásszerűen is változik, és látható, hogy az első (B pont körüli) és második lépcső között viszonylag hosszabb idő telik el. A szabálytalan fogak megjelenése szintén a Lüders-sáv képződéssel kapcsolatos [8], de nem teljesen tisztázott, hogy miért kell ez az átmeneti tartomány a periodikus jelleg kialakulásához (ráadásul a feszültség-megnyúlás görbe kezdeti AC szakaszán nem észlelhető fogazat). A Lüders-sáv képződésnek ezt a sajátosságát több szerző [3, 9—12] annak tulajdonítja, hogy a szennyezőknek a diszlokációkhoz való gyors diffúziójához jelentős mennyiségű vakanciára van szükség és ezek nagy része a plasztikus alakváltozás során keletkezik.

Az eddigiekből is kitűnt, hogy a Portevin—Le Chatelier effektus kialakulásában sok tényezőnek lehet befolyásoló szerepe, így pl. a minta hibaszerkezetének (amely

az előzetes hőkezelési, öregítési feltételektől függ), a tesztelési hőmérsékletnek. Kísérleti és elméleti megfontolások is bizonyítják azonban, hogy mindenekelőtt a szennyező-diszlokáció kölcsönhatás az, ami alapvetően felelős az effektus kialakulásáért. A továbbiakban röviden áttekintjük ezeknek a tényezőknek a jelenség kialakulására, lefolyására kifejtett hatását.

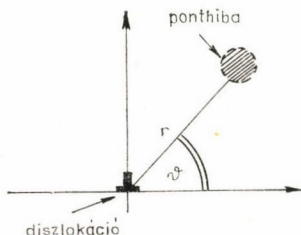
2. PONTHIBÁK DISZLOKÁCIÓK TERÉBEN

2.1. Diszlokációk és ponthiba kölcsönhatása

A diszlokációk és ponthiba közötti kölcsönhatásban a rugalmas kölcsönhatás dominál. Ez a kölcsönhatás a szennyező atomok és mátrixatomok közötti méretkülönbségből (mérethatás), valamint a rugalmas állandók különbözőségéből (moduluszhatás) származik.

Az egyszerűség kedvéért tekintsünk egy nyugvó, végtelen hosszú, **b** Burgers-vektorú egyenes éldiszlokációt, és az (r, ϑ) síkbeli polárkoordinátájú pontba helyezzünk el egy gömbszerű hibát (7. ábra), amelynek V_h térfogata nagyobb, mint a mátrixatomok V_m térfogata. Ha feltételezzük, hogy a hiba és mátrix anyagának térfogati rugalmassági állandói megegyeznek, a $\Delta V = V_h - V_m > 0$ méretkülönbségből adódóan az éldiszlokáció és oldott atomok között a lineáris rugalmasságtan alkalmazásával az

$$E = \frac{\mu}{3\pi} \frac{1+\nu}{1-\nu} b \Delta V \frac{\sin \vartheta}{r} = A \frac{\sin \vartheta}{r} \quad (3)$$



7. ábra. A diszlokáció-ponthiba kölcsönhatáshoz

nagyságú kölcsönhatási energia adódik [13–15]. A fenti kifejezésben μ , ν a mátrix nyírási modulusza, illetve Poisson száma. Az elsőként *Cottrell és Bilby* [22] által megadott (3) kifejezés szerint az éldiszlokáció és szennyező atomok között mindig létezik vonzó kölcsönhatás. A mátrixatomoknál nagyobb méretű atomok energetikailag kedvezőbb helyzetben vannak a

dilatált ($\pi < \vartheta < 2\pi$) zónában, míg pl. a vakanciákra ($\Delta V < 0$) a vonzó kölcsönhatás a komprimált zónában ($0 < \vartheta < \pi$) lép fel.

Tiszta csavardiszlokáció és gömbszimmetrikus ponthiba között nem lép fel kölcsönhatás a lineáris rugalmasságtan keretén belül. Ha azonban anizotrop közegben van a diszlokáció, vagy ha a hiba kiterjedt, akkor jelentkezik egy, a csavardiszlokáció feszültségtére által létrehozott kölcsönhatás, ami a távolsággal fordítottan arányos. A mérethatásból nemlineáris tagok figyelembevételével mind az él, mind pedig a csavardiszlokáció esetében további r^{-2} -al arányos (rövid hatótávolságú) energiajárulékok adódnak [16, 17].

Ha a szennyező atomok és mátrixatomok rugalmas tulajdonságai különbözőek, akkor $\Delta V = 0$ esetén is fellép egy kölcsönhatási energia a szennyezők és diszlokációk között [15, 18–20]. Ez az ún. modulusz-kölcsönhatás a távolsággal r^{-2} szerint változik. Nagyságát tekintve a moduluszhatásból származó energiajárulék legfeljebb néhány tizede a mérethatás energiájának.

Összességében megállapítható, hogy a diszlokáció magjától nagyobb távolságokra, a kölcsönhatásban valószínűleg az r^{-1} -nel változó energiajárulékok dominálnak. A maghoz közeledve azonban, az összes lineáris elméletből adódó eredmény a kölcsönhatási energiára végtelen nagy értéket ad. Ilyen és ehhez hasonló problémák miatt sokkal realisabbnak tűnhet, ezért az utóbbi évtizedekben kifejlesztett nemlokális-kontinuummélet néhány idevágó eredménye [21].

2.2. Szennyező atmoszféra kialakulása nyugvó diszlokáció körül

Tekintsünk egy egyenes diszlokációt, amely a koordináta-rendszer origóján halad keresztül. A továbbiakban megvizsgáljuk, hogy e diszlokáció környezetében hogyan változik meg a kezdetben c_0 koncentrációjú szennyezők homogén eloszlása a diszlokációval való kölcsönhatás következtében.

A diffúzió *Einstein* elmélete szerint, ha a diffundáló részecskék, esetünkben a szennyező atomok, egy $E(\mathbf{r}, t)$ potenciáltérben mozognak, akkor a

$$\mathbf{j}_1 = -D(\nabla c) \quad (4)$$

szokásos diffúziós áramon kívül egy

$$\mathbf{j}_2 = -\frac{Dc}{kT}(\nabla E) \quad (5)$$

nagyságú részecskeáram is fellép (c a részecskék koncentrációja, D diffúziós együttható, k a Boltzmann állandó, T az abszolút hőmérséklet). A diffúziós egyenlet ilyen esetben a

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla(\mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2) = D\nabla\left(\nabla c + \frac{c}{kT}\nabla E\right) \quad (6)$$

alakban írható fel, amelyből rögtön adódik a stacionárius állapothoz $\left(\frac{\partial c}{\partial t} = 0\right)$ tartozó

$$c(\mathbf{r}, t) = c_0 \exp\left\{-\frac{E(\mathbf{r})}{kT}\right\} \quad (7)$$

megoldás. Egy L hosszúságú egyenes diszlokációvonal mentén feldúsult szennyezők n számát az

$$n = L \int_{r_0}^R \int_0^{2\pi} (c - c_0) r d\vartheta dr \quad (8)$$

kifejezéssel adhatjuk meg, ahol $r_0 \cong (3-4)b$ (az a távolság, amelyen belül levő szennyezők száma már elhanyagolható), R pedig az egységnyi hosszúságú diszlokációhoz tartozó hengerszerű tartomány átlagos sugara (külső levágási sugár). Éldiszlokáció esetében

$$c(r, \vartheta) = c_0 \exp\left\{-\frac{A}{kT} \frac{\sin \vartheta}{r}\right\}. \quad (9)$$

Ezt a koncentrációeloszlást a (8) egyenletbe behelyettesítve, valamint feltételezve, hogy $A < kTr_0$, sorfejtés és a kijelölt műveletek elvégzése után az egységnyi hosszúságú diszlokációvonal mentén feldúsult szennyezők egyensúlyi számára

$$\frac{n}{L} = \frac{\pi}{2} c_0 \left(\frac{A}{kT} \right)^2 \ln \left(\frac{R}{r_0} \right) \quad (10)$$

adódik.

Cottrell és Bilby vizsgálták elsőként [22] ennek a szegregációnak az időbeli lefolyását. Feltételezték, hogy a folyamat kezdetén a koncentrációgradiens miatt fellépő szennyező diffúzió még elhanyagolható ($\nabla c \cong 0$) a drift diffúzió mellett. Ekkor (6)-ból a

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{D}{kT} \nabla(c \nabla E) = \frac{D}{kT} (\nabla c)(\nabla E) + \frac{D}{kT} c(\Delta E) \quad (11)$$

egyenlet adódik, amely éldiszlokáció esetében (ekkor Δ a síkbeli Laplace-operátor) a

$$\Delta \left(A \frac{\sin \vartheta}{r} \right) = 0 \quad (12)$$

azonosság miatt tovább egyszerűsödik:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{D}{kT} (\nabla c)(\nabla E). \quad (13)$$

Ezt az egyenletet polárkoordinátákban kifejtve a

$$\left(\frac{\partial c}{\partial t} \right) - \frac{AD}{kT} \frac{\sin \vartheta}{r^2} \left(\frac{\partial c}{\partial r} \right) + \frac{AD}{kT} \frac{\cos \vartheta}{r^3} \left(\frac{\partial c}{\partial \vartheta} \right) = 0 \quad (14)$$

homogén, elsőrendű parciális differenciálegyenletet kapjuk, amely a „karakterisztikák módszerének” segítségével megoldható. (Az általános megoldás, és az ehhez kapcsolódó igen részletes elemzések megtalálhatók a [23] munkában.) Homogén kezdeti eloszlás esetén, az éldiszlokációt tökéletes nyelőnek feltételezve az adódik, hogy a t időpillanatban egy

$$r^3(t, \vartheta) = \left(\frac{DA}{kT} t \right) \frac{2 \cos^3 \vartheta}{\pi/2 - \vartheta - \sin \vartheta \cos \vartheta} \quad (15)$$

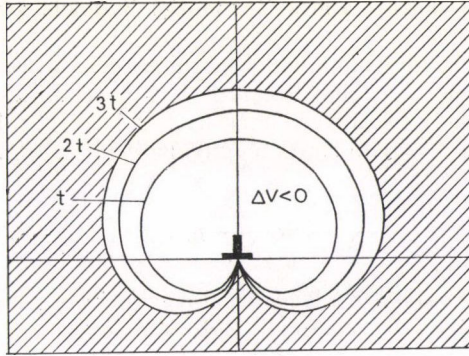
egyenlőséggel meghatározott síkbeli tartományban levő szennyezők tudnak eltűnni a diszlokáción (8. ábra). Az egységnyi hosszúságú diszlokáción szegregálódó atomok számára így az

$$\frac{n}{L} = c_0 \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} r^2(\vartheta) d\vartheta = 3c_0 \left(\frac{\pi}{2} \right)^{1/3} \left(\frac{DA}{kT} \right)^{2/3} t^{2/3} \quad (16)$$

eredmény adódik, amelyet Cottrell–Bilby összefüggésnek neveznek, az összegyűlt atomokra pedig gyakran Cottrell-felhő néven hivatkoznak [24].

Ha a diszlokációk és a ponthibák között fellépő kölcsönhatás egy

$$E = -\frac{A}{r^n} \quad (17)$$



8. ábra. Éldiszlókáció körüli szennyező szegregáció a (15) egyenlet alapján

alakú függvénnyel adható meg (n értékére nézve lásd a 2.1. fejezetet), akkor homogén kezdeti koncentrációeloszlás esetén a szegregáció időbeli lefolyása viszonylag könnyen nyomon követhető. (17)-nek (11)-be való behelyettesítése után a

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{DA}{kT} \left(\frac{n}{r^{n+1}} \left(\frac{\partial c}{\partial r} \right) - \frac{n^2}{r^{n+2}} c \right) \quad (18)$$

egyenletet kapjuk, amely a $\xi = t/r^{n+2}$ új változó bevezetésével az

$$\left(1 + \frac{DA}{kT} n(n+2) \xi \right) \left(\frac{\partial c}{\partial \xi} \right) + \frac{DA}{kT} n^2 c = 0 \quad (19)$$

alakra hozható. A változók szétválasztása után, mindkét oldalt integrálva és kihasználva azt a határfeltételt, hogy $c(\infty, t) = c(\xi=0) = c_0$, a

$$c(r, t) = \frac{c_0 r^n}{\left(r^{n+2} + \frac{DA}{kT} n(n+2) t \right)^{\frac{2}{n+2}}} \quad (20)$$

eloszlásfüggvényt kapjuk eredményül. Az n/L értékére a (8) egyenletbe történt visszahelyettesítés és integrálás után, $r_0=0$ és $R=\infty$ értékei mellett

$$\frac{n}{L} = [n(n+2)]^{\frac{2}{n+2}} c_0 \left(\frac{DA}{kT} \right)^{\frac{2}{n+2}} t^{\frac{2}{n+2}} \quad (21)$$

adódik. A kapott eredmény szerint, ha $E \sim r^{-1}$, akkor a szegregált atomok száma az eltelt idő $2/3$ -adik hatványával arányos, amely megegyezik a kölcsönhatásban a szögfüggést is figyelembe vevő Cottrell—Bilby eredmény időfüggésével, míg $n=2$ esetén viszont $n(t) \sim t^{1/2}$. A szegregáció időbeli lefutásának kezdeti szakasza ily módon tehát lehetőséget nyújt n értékének meghatározására, evvel egyidejűleg információt kaphatunk a mátrixban végbemenő — esetleg többféle — ponthiba-diszlókáció kölcsönhatás mechanizmusának jellegéről [25].

2.3. Szennyező atmoszféra mozgó diszlokáció körül

A mátrixban levő diszlokációk külső feszültség hatására kihajolhatnak a rögzítési pontok (ezek lehetnek pl. szennyező atomok, vakanciák, diszlokációhurkok, stb.) között, majd kellően nagy feszültség esetén leszakadva ezekről, a csúszósíokban történő mozgásukkal a minta maradandó megnyúlását idézik elő. Egytengelyű nyújtás esetén az

$$\dot{\varepsilon} = \frac{b}{M_T} \rho_m \bar{v} \quad (22)$$

összefüggés az, ami megadja a \bar{v} átlagos diszlokációsebesség és a makroszkopikusan észlelhető $\dot{\varepsilon}$ plasztikus nyújtási sebesség közötti kapcsolatot [14]. A fenti kifejezésben ρ_m a mozgó diszlokációk sűrűsége, b a Burgers-vektor, az $M_T \approx 3,06$ mennyiség a Taylor-faktor, amely a minta polikristályos szerkezetét veszi figyelembe. Ahogy a fenti összefüggés is mutatja, a kísérletileg nyerhető $\sigma - \varepsilon$ összefüggések értelmezésében alapvető szerepe van a diszlokációt mozgató τ feszültség és a v diszlokációsebesség közötti kapcsolat ismeretének.

Cottrell és Jaswon [26] vizsgálták elsőként egy külső feszültség hatására v sebességgel mozgó egyenes éldiszlokáció körül kialakuló szennyező eloszlást, és ennek a felhőnek a fékező hatását a diszlokációra. Diszlokációhoz rögzített koordináta rendszert választva ilyenkor egy

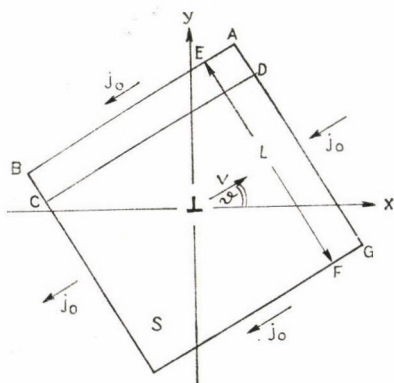
$$\mathbf{j}_3 = -v\mathbf{c} \quad (23)$$

nagyságú „látszólagos” részecskeáram is fellép a (6) egyenletben:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla(\mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2 + \mathbf{j}_3) = D\nabla \left(\nabla c + c \left[\frac{\nabla E}{kT} + \frac{\mathbf{v}}{D} \right] \right). \quad (24)$$

Ebből az egyenletből elvileg meghatározható pl. a stacionárius állapothoz tartozó $c_v(\mathbf{r})$ eloszlásfüggvény. Ennek ismeretében a diszlokációra ható erő az

$$\mathbf{F}(\mathbf{v}) = - \int_{R^3} c_v(\mathbf{r}) \nabla E(\mathbf{r}) dV(\mathbf{r}) \quad (25)$$



9. ábra. A (30) összefüggés levezetéséhez

összefüggéssel adható meg. A tényleges számolás elvégzése azonban — egyszerű modellpotenciálok esetén is —, meglehetősen hosszadalmas és eközben számos, további egyszerűsítő feltételezést kell még kihasználni [27]. Néhány tulajdonsága az $(F/L) \leftrightarrow v$ összefüggésnek azonban a megoldás pontos ismerete nélkül is előre megmondható.

Tekintsük például a 9. ábrán látható, kis v sebességgel mozgó egyenes éldiszlokációt. Jelölje S az alapterületét, L a magasságát egy olyan négyzetes alapú hasábnak, amelynek a mindenkor tengelyében helyezkedik el ez a diszlokáció, és a hasáb palástja mentén pedig a koncentráció gyakorlatilag még mindenhol

c_0 értékűnek tekinthető. A \mathbf{j} diffúziós áramsűrűségnek erre a V hasábra vett térfogati integrálja a Gauss-tétel felhasználásával az

$$\int_V \mathbf{j} dV = L \int_S \mathbf{j} dS = -LS c_0 \mathbf{v} = -\mathbf{v} \int_V c_0 dV \quad (26)$$

alakban kifejezhető [28]. Másrészt behelyettesítve a

$$\mathbf{j} = -D(\nabla c) - \frac{Dc}{kT} (\nabla E) - c\mathbf{v} \quad (27)$$

összefüggést a fenti egyenlőség bal oldalába, a

$$-D \int_V (\nabla c) dV - \frac{D}{kT} \int_V c (\nabla E) dV - \mathbf{v} \int_V c dV = -\mathbf{v} \int_V c_0 dV \quad (28)$$

egyenletet kapjuk, amelyből a (25)-ben szereplő $\mathbf{F}(\mathbf{v})$ függvény a

$$\int_V (\nabla c) dV = \mathbf{0} \quad (29)$$

azonosság felhasználásával kifejezhető az

$$\mathbf{F}(\mathbf{v}) = \mathbf{v} \frac{kT}{D} \int_V (c - c_0) dV \quad (30)$$

formában. Kis sebességeknél c majdnem megegyezik a $\mathbf{v}=\mathbf{0}$ -hoz tartozó

$$c(\mathbf{r}) = c_0 \exp \left\{ -\frac{E}{kT} \right\} \quad (31)$$

egyensúlyi koncentrációeloszlással. Beírva ezt az eredményt a (30) egyenletbe az

$$\mathbf{F}(\mathbf{v}) = \mathbf{v} L \left[\frac{kTc_0}{D} \int_S \left(\exp \left\{ -\frac{E}{kT} \right\} - 1 \right) dS \right] \quad (32)$$

eredményt kapjuk, amely szerint alacsony diszlokációsebesség esetén az egységnyi hosszúságú diszlokációra ható \mathbf{F}/L fékezőerő nagysága független a mozgás irányától. A fenti egyenletben szereplő

$$\alpha = \frac{|\mathbf{F}/L|}{|\mathbf{v}|} = \frac{kTc_0}{D} \int_S \left(\exp \left\{ -\frac{E}{kT} \right\} - 1 \right) dS \quad (33)$$

viszkózitási együttható értéke éldiszlokáció esetén az

$$\alpha \cong \frac{kTc_0}{D} \int_{r_0}^R \int_0^{2\pi} \left(\exp \left\{ -\frac{A}{kT} \frac{\sin \vartheta}{r} \right\} - 1 \right) r d\vartheta dr \quad (34)$$

integrállal számolható.

Ezen utóbbi egyenletben az S tartományt helyettesítettük az egyszerűség kedvéért egy r_0 belső, R külső sugarú körgyűrűvel. Hirth és Lothe körültekintő és részletes elemzése az r_0 és R sugarakra az

$$r_0 \cong \frac{|A|}{kT} \quad (35)$$

és

$$R \cong \frac{D}{v} \quad (36)$$

eredményeket adja [27]. Kihasználva, hogy $r > |A|/kT$, az integrandus sorfejtése és integrálás után

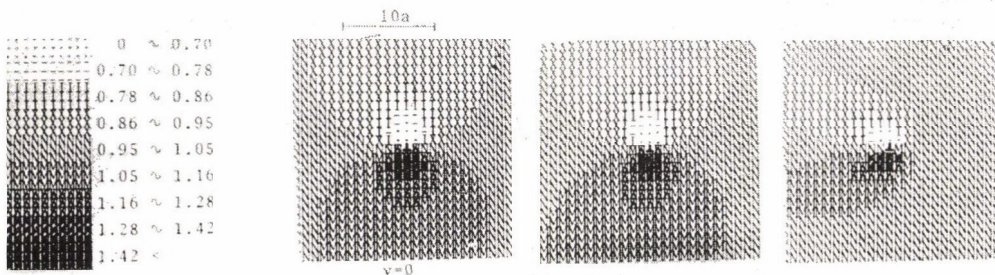
$$\alpha = \frac{\pi}{2} \frac{A^2 c_0}{DkT} \ln \left(\frac{R}{r_0} \right) = \frac{\pi}{2} \frac{A^2 c_0}{DkT} \ln \left(\frac{DkT}{|A|v} \right). \quad (37)$$

Az éldiszlókáció kis v sebességekkel történő egyenletes mozgatásához szükséges $\tau b = F/L$ hosszegységnyi szakaszra ható erő nagysága így [26–28]:

$$\tau b = v \frac{\pi}{2} \frac{A^2 c_0}{DkT} \ln \left(\frac{DkT}{|A|v} \right). \quad (38)$$

Növekvő τ feszültség esetén a diszlókáció sebessége egyre nő. Amikor viszont olyan nagy sebességet ér el a mozgó diszlókáció, hogy a szennyező diffúzióval létrejövő Cottrell atmoszféra erősen elhúzódva, leszakadva tudja csak követni a diszlókációt ($D/vr_0 \ll 1$), akkor már várható, hogy kisebb feszültség is elegendő esetleg a sebességének megtartásához, hiszen a szennyező-diszlókáció kölcsönhatásból kisebb fékező erő adódik. Takeuchi és Argon [28] a diffúziós egyenlet numerikus úton történt megoldásával meghatározta különböző irányokban, különböző sebességekkel mozgó éldiszlókáció körül kialakuló szennyező eloszlást, valamint a fékező erőt. A 10. ábra egy csúszó éldiszlókáció ($\vartheta=0$) körül kialakult koncentrációeloszlást mutatja különböző (vr_0/D) értékek mellett. Jól látható az ábrán a nagyobb sebességeknél kifejlődő, elnyúlt, csóvaalakú, aszimmetrikus szennyező felhő. A nagy sebességeknél fellépő fékezőerő Cottrell és Jaswon [26] szerint (lásd még Hirth és Lothe [27])

$$v > v'_c = \frac{D|A|}{kTb^2} \quad (39)$$



10. ábra. Csúszó éldiszlókáció ($\vartheta=0$) körül kialakult szennyező eloszlás különböző vr_0/D relatív sebességeknél [28]

esetén a

$$\tau b = \frac{\pi}{v} \frac{DA^2 c_0}{kTb^2} \quad (40)$$

formulával közelíthető.

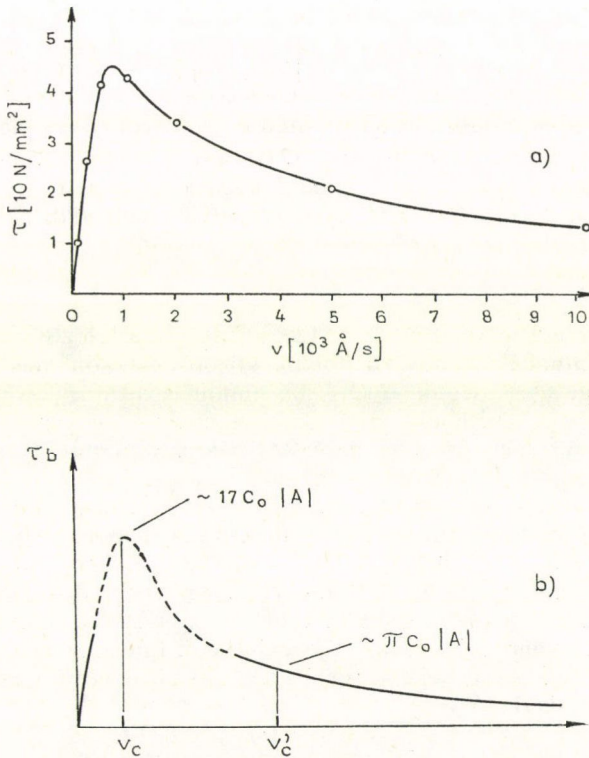
A $\tau-v$ összefüggés kis és nagy sebességekre ismert $\tau \sim v$ és $\tau \sim v^{-1}$ alakjából adódik, hogy egy kritikus v_c sebességnél a fékező erőnek maximuma kell hogy legyen. Yoshinaga és Morozumi [29] számítógépes eljárással kapott $\tau-v$ összefüggése látható a 11/a. ábrán. A kritikus v_c sebességre és a $(\tau b)_{\max}$ maximális fékezőerőre adódó számszerű értékek jó egyezést mutattak a Cottrell és Jaswon által megadott

$$v_c \cong \frac{4DkT}{|A|} = 4v'_c \left(\frac{kTb}{A} \right)^2 \quad (41)$$

és

$$(\tau b)_{\max} = 17c_0 |A| \quad (42)$$

eredményekkel (11/b. ábra).



11. ábra. Számítógépes eljárás során nyert $\tau-v$ kapcsolat [29] (a), sematikusan ábrázolt $\tau-v$ kapcsolat [27] (b)

3. A PLE ÉRTELMEZÉSE A SZENNYEZŐKNEK A DISZLOKÁCIÓMOZGÁSRA KIFEJTETT FÉKEZŐ HATÁSA ALAPJÁN

A diszlokáció és szennyezőfelhő kölcsönhatásnak az a jellegzetes tulajdonsága, hogy egy kritikus sebesség felett a diszlokáció egyenletes mozgatásához szükséges feszültség csökken a sebesség növekedésével, alapvetően fontos a PLE létrejöttében.

Ismeretes, hogy a diszlokációk mozgásuk közben átmetszhetik egymást és egymás lépcsők és kiterjedt lépcsők keletkeznek rajtuk. A lépcsők mozgatásához meghatározott energiára, illetve erőre van szükség, amelyet általában a külső feszültség nem mindig tud hiánytalanul fedezni, ezáltal a diszlokáció a metszéspontban ideiglenesen rögzítődik. Ha E_0 jelöli a lépcsőmozgás aktiválási energiáját külső feszültség hiányában, és τ a diszlokáció csúszási síkjában, a csúszási irányban működő feszültséget, akkor

$$E(\tau) = E_0 - b(\tau b l) \quad (43)$$

a lépcsőmozgás által szabályozott folyamat aktiválási energiája, ahol l a diszlokációvonalon a szomszédos rögzítő pontok közötti átlagos távolság. Mivel a lépcsők mozgása termikusan aktiválható, az $\dot{\epsilon}$ plasztikus nyúlási sebesség hőmérséklettől való függését egy

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_0 \exp \left\{ -\frac{E(\tau)}{kT} \right\} \quad (44)$$

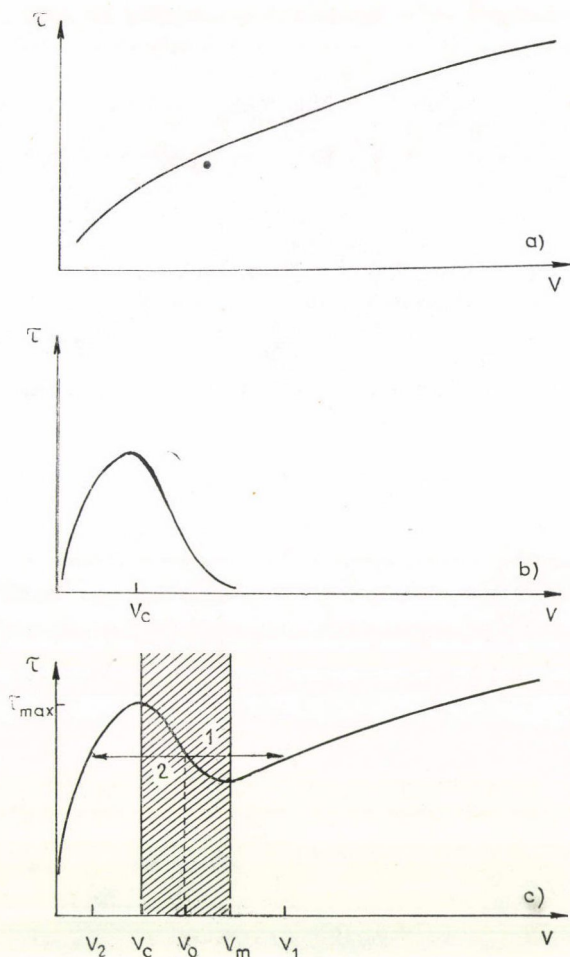
Boltzmann-típusú egyenlet adja meg [14], ahol $\dot{\epsilon}_0$ általában függ a hőmérséklettől és az aktiválható diszlokációk számától is. A (22), (43) és (44) összefüggésekből következik, hogy egy tiszta fémekben a v átlagos diszlokációsebesség és a τ csúsztató feszültség között — olyan rövid időtartamra vonatkoztatva, amely alatt nem változik meg lényegesen a minta hibaszerkezete —, egy

$$\tau - \tau_0 \sim \ln v \quad (45)$$

logaritmikus függvénykapcsolat áll fenn (12a. ábra), míg az előző fejezetben tárgyalt diszlokáció és a diffundáló szennyező atomok közötti kölcsönhatás a 12b. ábrán látható módon függ a sebességtől. A két hatás mindig egyidejűleg érvényesül és a 12c. ábra azt mutatja, hogy e kétféle hatás eredményeképpen adott v sebességgel történő diszlokációmozgáshoz mekkora τ feszültség szükséges. Ezen utóbbi ábrán jól látható, hogy nagy sebességeknél lényegében a diszlokációátvágtási mechanizmusokhoz, lépcsők mozgatásához szükséges a τ feszültség, míg kisebb sebességeknél a Cottrell-felhők mozgatása is jelentős feszültséget igényelhet. Az így kapott görbe egy jellegzetessége, hogy a $v \cong v_c$ és $v = v_m$ helyeken lokális maximuma, illetve minimuma van a τ feszültségnek. Ebben a $v_c < v < v_m$ tartományban a növekvő diszlokációsebességhez egyre kisebb fékezőerő tartozik, ezért ez a tartomány a stabil, hosszabb ideig tartó diszlokációmozgás szempontjából tilosnak tekinthető. Ennek igazolására tekintsünk egy diszlokációt, amelynek v_0 sebessége ebbe a tiltott tartományba esik. A diszlokációmozgás lokálisan leírható a

$$\dot{v} \sim \tau_k - \tau(v)$$

egyenlettel, ahol τ_k a külső-, $\tau(v)$ pedig a fékezőfeszültség nagysága. Állandó v_0 sebességű mozgáskor $\tau_k = \tau(v_0)$. Ha ennek a v_0 sebességű diszlokációnak valamilyen oknál



12. ábra. Feszültség alatti mintában, a termikusan aktivált diszlokációmozgás közben fellépő fékezőerő sebességfüggése (45) alapján (a), a Cottrell-felhőktől származó fékezőerő sebességfüggése (b), a két hatás együttes eredménye (c)

fogva Δv -vel megnő a sebessége, ez a

$$\dot{v} \sim \tau_k - \tau(v_0 + \Delta v) > 0 \quad (46)$$

feltétel miatt további rohamos sebességnövekedést eredményez és a diszlokáció az 1. irányba mozogva elhagyja a v_m pontot, majd olyan v_1 sebességet ér el, amelyre a $\tau_k = \tau(v_1)$ teljesül. Amennyiben viszont ha Δv -vel csökken a sebesség, akkor a

$$\tau_k - \tau(v_0 - \Delta v) \sim \dot{v} < 0 \quad (47)$$

erő a diszlokáció sebességének további csökkenését idézi elő, és a diszlokáció most a 2. irányba mozogva éri el azt a $v_2 < v_c$ pontot, amelynél $\tau_k = \tau(v_2)$. A diszlokáció sebessége tehát mindkét esetben kikerül a $v_c < v < v_m$ tiltott sebességtartományból.

A továbbiakban áttekintjük, hogy különböző \bar{v} átlagos diszlokációsebességekhez milyen feszültség-megnyúlás görbék tartozhatnak, akkor ha a diszlokációk és szennyezőik közötti kölcsönhatás jellege a 12c. ábrán látható módon adható meg. Meg kell azonban jegyeznünk, hogy ez az analízis csak rövid időtartamokra vonatkozik, hiszen a deformáció előrehaladtával megváltozik a minta hibaszerkezete, — többek között megnő a vakanciák, diszlokációk száma —, és ez egyidejűleg a $\tau-v$ kapcsolatot megváltoztat is eredményezi. Másfelől, amint ez a (22)-ből is következik, egy $\dot{\epsilon}$ =áll. nyújtási sebességhez a növekvő deformáció során egyre kisebb átlagos diszlokációsebességre van szükség. Feltételezhető azonban, hogy rövid időtartamokon belül a fent említett változások elhanyagolhatók (kvázistacionárius PLE állapot). Az alábbiakban négy lényegesen különböző esetet tárgyalunk, amelyek a pillanatnyi átlagos diszlokációsebességnek a függvényei [30].

I. $\bar{v} \gg v_m$

Azoknál a diszlokációsebességeknél, amelyekre $\tau(\bar{v}) > \tau_{\max}$ a diffúziós folyamatoknak gyakorlatilag nincs szerepük, hiszen az igen gyorsan mozgó diszlokációkra a Cottrell-felhők hatása kicsi. Ez igaz a $\bar{v} > v_m$ és $\tau(\bar{v}) < \tau_{\max}$ esetén is, mindaddig amíg az időegység alatt lefékeződő diszlokációk száma az újonnan keletkezettek számához képest elhanyagolható. Ezekben az esetekben többnyire a szokásos, sima feszültség-megnyúlás görbék adódnak a szakítási kísérletekből.

II. $\bar{v} > v_m$

A csökkenő \bar{v} diszlokációsebességgel az időegység alatt lefékeződő diszlokációk q_f száma egyre nő. Mivel a mintára a kívülről rákényszerített deformáció sebessége és ezzel együtt egy adott időpillanatban \bar{v} is állandó, ez azt jelenti hogy a nem blokkolt diszlokációk \bar{v}_{nf} sebességének nőnie kell a

$$(q_f + q_{nf})\bar{v} = q_f \bar{v}_f + q_{nf} \bar{v}_{nf} \quad (48)$$

összefüggésnek megfelelően. Ezt ábrázoltuk sematikusán a 13.a. ábrán. Az 1 ponttal jelölt, kezdetben \bar{v} sebességű diszlokációk egy részének a sebessége kisebb ($\bar{v}_f < v_c$, $1 \rightarrow 2'$ átmenet), a maradék átlagos sebessége pedig nagyobb lesz, mint \bar{v} ($\bar{v}_{nf} > v_m$, $1 \rightarrow 2$ átmenet), a feszültség egy kis növekedése után. A további feszültség-növekedés, a $2 \rightarrow 3$, illetve $2' \rightarrow 3'$ átmenetet eredményezi, amely egy későbbi, még több fékezett diszlokációhoz tartozó állapotot jelent. Amennyiben $\tau > \tau_{\max}$ az addig fékezett diszlokációk kiszakadva a Cottrell-felhők vonzásából, a tiltott sebességtartományon áthaladva a $3'$ állapotból a 3 állapotba kerülnek. Ennek következtében az átlagos diszlokációsebesség sokkal nagyobb lesz, mint ami az adott alakítási sebesség ($\bar{v} \sim \dot{\epsilon}$ =áll.) megtartásához szükséges. Ezért a feszültség meredeken leesik, amelyet a $3 \rightarrow 4$ átmenet jellemez, és a hirtelen megnövekedett számú és nagysebességű diszlokáció (amelyek a leszakadási, illetve diszlokációsokszorozódási folyamatok során keletkeznek) pedig egy a mintán kiterjedő Lüders-sáv létrejöttét eredményezi. A Lüders-sáv határának, az úgynevezett Lüders-frontnak a mozgása során a feszültség csak

igen lassan emelkedik, és ha eltekintünk a Lüders-sáv teljes kiszélesedéséig szükséges idő alatt fellépő keménységnövekedéstől, akkor a minta visszakerül az 1. állapotba. Az eddigieket figyelembe véve várható, hogy a keményedési görbe jellege hasonló lesz a 13b. ábrán vázoltéhoz.

Ha w jelöli a kiterjedt Lüders-sáv szélességét és t_L az ennek kialakulásához szükséges időt, akkor a Lüders-front átlagos v_L sebessége:

$$v_L = \frac{w}{t_L} \quad (49)$$

és az ε_L relatív Lüders-megnyúlás között az

$$\varepsilon_L v_L = \dot{\varepsilon} l \quad (50)$$

kapcsolat áll fenn [31]. A határban mozgó diszlokációk sűrűségét ϱ_L -le jelölve, ezeknek a v_L^d sebessége a plasztikus deformáció alapösszefüggéséből a

$$v_L^d = \frac{\dot{\varepsilon}_L}{b\varrho_L} \quad (51)$$

alakban adható meg, ahol $\dot{\varepsilon}_L$ a lokális Lüders-megnyúlás sebessége, az (50) és (49) egyenletekből az

$$\dot{\varepsilon}_L = \dot{\varepsilon} \left(\frac{l}{w} \right) \quad (52)$$

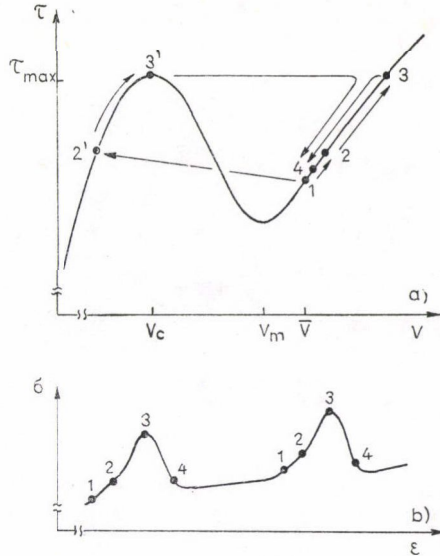
formában kifejezhető. Az előbbi összefüggések közvetlen következményeként adódik az ε_L és ϱ_L közötti

$$\varepsilon_L = b w \varrho_L \left(\frac{v_L^d}{v_L} \right) \quad (53)$$

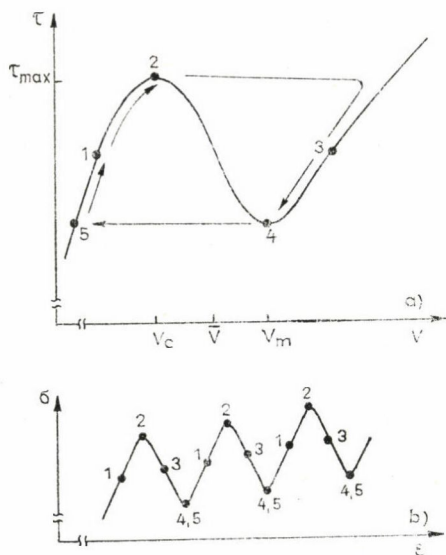
kapcsolat, amelynek a jelentőségére a későbbiekben visszatérünk.

III. $v_c < \bar{v} < v_m$

Ha a \bar{v} átlagsebesség v_c és v_m közé esik, akkor a mozgásukban fékezett diszlokációk aránya magas lehet. Vizsgálatunk kiindulási pontjaként egy ilyen állapotot választottunk (14a. ábra, 1 pont), amelynél gyakorlatilag minden diszlokáció erősen fékezett. A diszlokációsebesség túl kicsi ahhoz, hogy egy olyan képlékeny alakítási sebességet hozzon létre, mint ami a szakítógép keresztfejsebessége alapján megnövekelhető lenne. Ezért a feszültség egy kemény gépnél hirtelen emelkedik (1→2 átmenet). Egy különösen nagy feszültségkoncentrációjú helyen egy Lüders-sáv leválik, amelyben a diszlokációk viszont most már lényegesen nagyobb sebességgel mozognak



13. ábra. PLE értelmezése a $\tau-v$ kapcsolat alapján a $\bar{v} > v_m$ esetben (a), az a) ábrának megfelelő $\sigma-\varepsilon$ görbe (b)



14. ábra. PLE értelmezése a $\tau-v$ kapcsolat alapján a $v_c < \bar{v} < v_m$ esetében (a), az a) ábrának megfelelő $\sigma-\varepsilon$ görbe (b)

annál, mint amekkora az adott alakítási sebesség megtartásához szükséges lenne. Ez egy feszültségesést, és a Lüders-sáv diszlokációinak lassulását eredményezi egészen a v_m sebességig (4 pont). Mivel még ez a diszlokációsebesség is nagyobb a kívántnál, ezért a feszültség tovább csökken. Ez az állapot viszont olyan, hogy a feszültség további kismértékű csökkenése a diszlokációk túlnyomó részének hirtelen lefékeződését eredményezi. A diszlokációk a tiltott zónán áthaladva a 4-ből az 5 helyzetbe kerülnek. Az 5 pontbeli sebességük viszont már kisebb lesz, mint ami az adott keresztfejsebességhez tartozna, ezért a feszültség ismét meredeken emelkedik, míg a kiindulási helyzetbe kerül vissza a próbatest (5→1 átmenet). A folyamat eredményeként kapott feszültség-megnyúlás görbe várható lefutása a 14b. ábrán látható.

IV. $\bar{v} < v_c$

Amennyiben az átlagos diszlokációsebesség kisebb mint a kritikus v_c sebességérték, akkor sima, fogazat nélküli keményedési görbék jellemzik a szakítási kísérleteket.

4. A PLE-VEL KAPCSOLATOS KÍSÉRLETI EREDMÉNYEK ÉS ÉRTELMEZÉSÜK

4.1. A Cottrell-modell

Az irodalomban lényegében két alapvető modell terjedt el a fűrészes folyással kapcsolatos jelenségek magyarázatára, a kísérleti eredmények kiértékelésére.

Az első a Cottrell-féle [32] és Russel [3] által továbbfejlesztett dinamikus nyúlási öregedés modellje. Ez a modell lényegében a 3. fejezetben megismert mechanizmussal magyarázza a PLE létrejöttét. Ennek alapján először akkor várhatóak fogak a feszültség-megnyúlás görbén, amikor a diszlokációk átlagsebessége eléri a kritikus v_c sebességértéket (lásd a 3. fejezetet):

$$\bar{v} \cong v_c = \frac{4DkT}{|A|} = \frac{4D}{l}, \quad (54)$$

ahol $l=r_0=|A|/kT$ az effektív sugara a szennyező zónának. E fenti összefüggést gyakran úgy interpretálják, hogy a PLE kezdetekor a \bar{v} diszlokációsebesség meghaladja a szennyező atomok driftsebességét. Mivel ismert a \bar{v} és ε közötti kapcsolat

((22) egyenlet), a D diffúziós együttható pedig a

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{E_m + E_f}{kT} \right\} \quad (55)$$

alakban adható meg, ahol E_m, E_f a vakanciák mozgási aktiválási, illetve képződési energiája, (54) így az

$$\dot{\varepsilon} = \frac{4bD_0}{l} \exp \left\{ -\frac{E_m}{kT} \right\} \varrho C_v \quad (56)$$

alakra hozható (C_v a vakanciák, ϱ a diszlokációk pillanatnyi koncentrációját jelöli a minta egy adott állapotában).

A vakanciakoncentráció és megnyúlás közötti kapcsolat gyakran egy

$$C_v = K\varepsilon^m \quad (57)$$

hatványfüggvény alakjában adható meg. Ez az egyenlet jó egyezést mutat a *Van Bueren* modellből [33] nyerhető eredményekkel, amely modell a vakanciák keletkezését a nem konzervatív lépcsőmozgásoknak tulajdonítja. Van Bueren szerint egy-szeri csúszásoknál $m \cong 1.25$, többszörös csúszásoknál $m \cong 2$.

Egy másik lehetséges modell a deformáció alatti vakanciaképződésre *Saada*-tól származik [34]. Eszerint a vakanciák a mozgó diszlokációhurkoknak a diszlokáció-erdőkkel való metszése során keletkeznek, és a keletkező vakanciák száma a plasztikus munkával arányos:

$$C_v = K_1 \int_0^{\varepsilon} \sigma(\varepsilon') d\varepsilon'. \quad (58)$$

Azokban az esetekben amikor a tényleges feszültség és megnyúlás között egy

$$\sigma = K_2 \varepsilon^n \quad (59)$$

hatványfüggvény teremt kapcsolatot [35, 36], az (58) egyenlet jobb oldalának integrálása után (57)-tel való összehasonlításából az

$$m = n + 1 \quad (60)$$

összefüggés adódik.

Ham és *Jaffrey* [11] a mozgó diszlokációk ϱ sűrűsége és ε között egy az (57)-hez hasonló

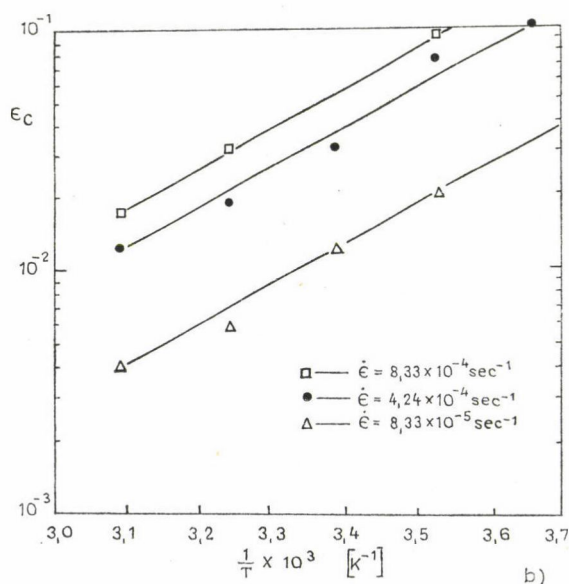
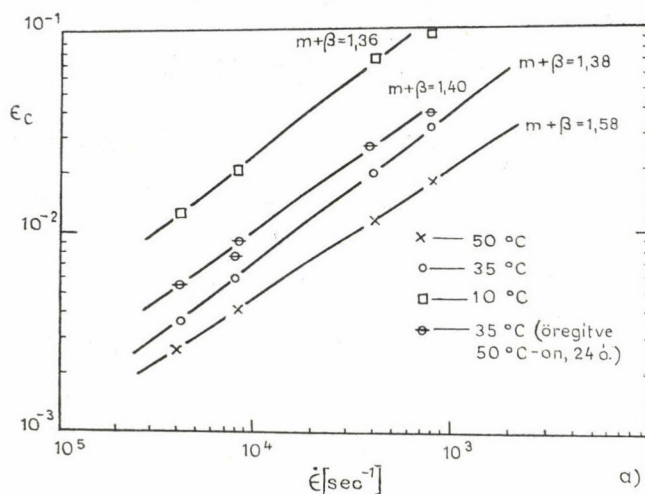
$$\varrho = N\varepsilon^\beta \quad (61)$$

függvénykapcsolatot tételezett fel. Az (57), (61) egyenleteknek (56)-ba történt behelyettesítésével a B típusú fogazott folyás kezdetét jellemző ε_c értékre így az

$$\varepsilon_c^{m+\beta} = \frac{l\dot{\varepsilon}}{4bKND_0} \exp \left\{ \frac{E_m}{kT} \right\} \quad (62)$$

egyenlet nyerhető. Ez az eredmény lehetőséget nyújt arra, hogy a különböző hőmérséklethez és nyújtási sebességekhez tartozó ε_c értékek ismeretében az $m+\beta$ és E_m paramétereket meghatározzuk.

Chaturvedi és Lloyd [37] Mg—10% Ag ötvözetben, szobahőmérséklet környezetében végzett méréseket a fogazott folyás tanulmányozására. Az $\ln \epsilon_c$ és $\ln \dot{\epsilon}$ között egy állandó hőmérsékletnél lineáris kapcsolat adódott, a kapott egyenes meredekségéből (62) alapján meghatározták az adott hőmérsékletre tartozó $m+\beta$ értéket (15a. ábra). Hasonlóképpen egyenesen helyezkedtek el egy állandó nyújtási sebesség esetén



15. ábra. $\log \epsilon_c$ és $\log \dot{\epsilon}$ közötti kapcsolat különböző hőmérsékleteknél Mg—10% Ag ötvözetben [37] (a), $\log \epsilon_c$ és $1/T$ közötti kapcsolat (mozgási aktiválási energia meghatározásához) Mg—10% Ag ötvözetben (b)

a különböző hőmérsékletekhez tartozó $1/T$, $\ln \varepsilon_c$ pontok. Ezen egyenesek iránytangenséből a vakanciák mozgási aktiválási energiájára az $E_m = 0,46$ eV értéket kapták (15b. ábra). A tényleges feszültség-megnyúlás görbék kezdeti, sima szakaszából pedig meghatározták n értékét, amely a minta szemcseméretétől gyakorlatilag nem mutatott, függést. A hőmérséklet emelésével viszont n értéke nőtt (pl. $T = 10^\circ\text{C}$ -nál $n \approx 0,36$ míg $T = 35^\circ\text{C}$ -nál $n \approx 0,46$). Az $m = n + 1$ kapcsolat alapján a mért $m + \beta$ értékekből a $\beta \approx 0$ adódott, amely eredmény azt sugallja, hogy ennél az ötvözetnél a fogazott folyás kezdetekor meglevő mozgó diszlokációk sűrűsége gyakorlatilag független a megnyúlástól. Ezt a feltételezést egyébként megerősíti néhány, a plasztikus folyásra vonatkozó számítógépes szimuláció eredménye is [38, 39]. Hasonló módszerekkel szintén a $\beta \approx 0$ eredményre jutottak *Matsuura és munkatársai* [40] Al—5,6% Mg és Al—8,6% Mg ötvözetekben ($m + \beta \approx 1,1$, $n \approx 0,2$), *Mc Cormick* [41] Al—0,45% Mg—0,35% Si ötvözetben ($m + \beta \approx 1,37$, $n \approx 0,2$), valamint *Lloyd és társai* [42] egy Co—Ni—Cr—Ti alapanyagú szuperötvözetnél ($m + \beta \approx 1,4$, $n \approx 0,36$).

Ezek a kísérletek azonban néhány fémben — elsősorban Cu és Au alapanyagú ötvözetekben — az $m + \beta$ -ra viszonylag nagy értékeket szolgáltatnak. *Russel* [3] négy különböző összetételű Cu—Sn ötvözetben azt találta, hogy $m + \beta \approx 2,2$, és a feszültség-megnyúlás görbék gyakorlatilag lineárisan változtak a $0 < \varepsilon < \varepsilon_c$ tartományban, amelyből az $m \approx 2$ -re és $\beta \approx 0,2$ -re következtetett. *Lloyd* egy lényegesen nagyobb $\beta \approx 0,7$ értéket kapott hasonló összetételű (Cu—5% Sn) mintánál az $m + \beta \approx 2,2$ és $n \approx 0,5$ kísérleti eredményekből [43]. *Wijler és munkatársainak* [36] Au—7,5% Cu összetételű mintánál $m + \beta \approx 2,4$, $n \approx 0,43$ -ból a $\beta \approx 0,9$, míg az Au—14% Cu mintánál $m + \beta \approx 1,7$, $n \approx 0,2$ -ből a $\beta \approx 0,5$, hasonlóan magas β értékek adódtak.

Mivel az alakítási keményedésre vonatkozó jelenlegi elméletek a folyásfeszültség és a ϱ_t teljes diszlokációsűrűség között általában egy

$$\sigma = \sigma_0 + K_3 \sqrt{\varrho_t} \quad (63)$$

függvénykapcsolatra vezetnek [44, 45] (σ_0 és K_3 állandók), a $\sigma_0 \ll \sigma$ feltétel teljesülése esetén, felhasználva az (59) egyenletet:

$$\varrho_t \sim \sigma^2 \sim \varepsilon^{2n}. \quad (64)$$

A fenti, réztartalmú mintákra vonatkozó kísérletekben tehát, amelyeknél az n és β értékekre $2n \approx \beta$, a *Saada* modell alapján feltételezhető [36], hogy a mozgó diszlokációk száma egyenesen arányos az összes diszlokációk számával:

$$\varrho \sim \varepsilon^\beta = \varepsilon^{2n} \sim \varrho_t. \quad (65)$$

Cu egykristálnál *Basinski és Saimoto* [46], polikristályos Cu-nél pedig *Tseng* [47] kísérleti eredményei azt jelzik, hogy a vakanciák termelődése a plasztikus deformáció közben sokkal gyorsabb, mint ahogy az a *Saada* elméletből következne. Az említett szerzők feltételezése szerint ezekben az anyagokban

$$C_v \sim \int_0^\varepsilon \sigma^2(\varepsilon') d\varepsilon', \quad (66)$$

amelyből (59), (60) mintájára

$$m = 2n + 1. \quad (67)$$

*Lloyd*nak [43] azon elképzelését, hogy $\beta \cong 0$ réztartalmú minták esetében is a (66) feltevés alátámasztani látszik. Az $m=2n+1$ összefüggésből Cu—5% Sn-nél $\beta \cong 0,2$, Au—7,5% Cu-nél $\beta \cong 0,5$, míg az Au—14% Cu-nél a $\beta \cong 0,3$ érték adódik. (66) egyébként még további számos esetben eredményez zérushoz közeli β értékeket [48—50].

A fogazott folyással kapcsolatos jelenségek sok szempontból kielégítő módon leírhatók az (56), illetve az ebből származtatott (62) összefüggésekkel. *Mc Cormick* [51] az (56) egyenlet kapcsán rámutatott arra, hogyha a benne szereplő mennyiségek helyére a kísérletekből nyerhető, valóságos értékeknek megfelelőt írunk, akkor a mozgó diszlokációk sűrűségére $\rho \sim 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ adódik. Ez legalább négy nagyságrenddel nagyobb annál, mint ami az adott körülmények között egyébként várható lenne. A fenti ellentmondás feloldására a szerző egy új modellt javasolt a nyúlási öregezés elméletére.

4.2. A Mc Cormick-modell

Az előbbi fejezetben ismertetett Cottrell-modell burkoltan az összes diszlokációnak egyidejű, folytonos mozgását tételezi fel és e mozgás közbeni szennyező-diszlokáció kölcsönhatást veszi alapul a PLE tárgyalásakor. A valóságban a diszlokációk mozgása azonban nem folytonosan, hanem többnyire szakaszosan megy végbe, a mintában levő különböző akadályok között. Ezek az akadályok lefékezhetik, rögzíthetik a diszlokációt. Külső feszültség hatására a diszlokációk kihajolhatnak a rögzítési pontok között, majd elegendően nagy feszültség esetén leválva ezekről ismét mozgásba lendülhetnek. Mivel mozgásuk közben a rács atomjainak energiát adnak át, lefékeződnek, és így várható, hogy rövid időn belül az újabb rácsbeli akadályok ismét megakasztják a mozgó diszlokációkat. Jelölje t_v a diszlokációknak egy akadállyal eltöltött átlagos várakozási idejét, t_m pedig legyen az egy ugrási folyamathoz szükséges átlagidő (a Cottrell-modellben $t_v \cong 0$).

A Mc Cormick-modell alapjául *Sleswyk* [52] azon elképzelése szolgált, hogy a deformáció alatt a mozgásképes diszlokációk idejük legnagyobb részét különböző akadályoknál — mozgásukban gátolva — várakozással töltik ($t_m \cong 0$). Ez egyben azt is jelenti, hogy a diszlokációknak az ugráló mozgása szinte pillanatszerűen, igen nagy sebességgel megy végbe az egymástól L átlagos távolságra levő akadályok között. E nagysebességű mozgás közben a szennyező atomok és diszlokációk kölcsönhatása jelentéktelennek tekinthető (lásd a 2.3. fejezetet). Az akadályoknál várakozó diszlokációk azonban átlagosan t_v ideig maguk köré gyűjthetik a szennyező atomokat és ezáltal egy olyan atmoszféra jöhet létre, amelyből pillanatnyilag már nem tud kiszabadulni a diszlokáció az adott külső feszültség mellett. Ha t_a az az idő, amely idő alatt szegregálódó atomok a diszlokáció rögzítődését eredményezik, akkor ez (16)-ból a

$$t_a = \left(\frac{n/Lb^2}{\alpha c_0} \right)^{3/2} \frac{kT}{DA} b^3 = \left(\frac{c^*}{\alpha c_0} \right)^{3/2} \frac{b^3}{Dl} \quad (68)$$

formában kifejezhető, ahol c^* a diszlokáció rögzítéséhez szükséges koncentráció (számításoknál gyakran a $c^* \cong b^{-3}$ feltevéssel élnek), míg α -val itt az

$$\alpha = 3 \left(\frac{\pi}{2} \right)^{1/3} \cong 3,5 \quad (69)$$

állandót jelöltük. *Mc Cormick* szerint, a fogazott folyáskor a várakozási idő már olyan nagy, hogy ezalatt a diszlokációk rögzítődnek ($t_v > t_a$) és ebből a rögzítésből csak a külső feszültség növekedésével tudnak kiszabadulni. A PLE kezdetekor a szerző szerint a

$$t_v \cong t_a \quad (70)$$

feltétel teljesül. Mivel a várakozási idő és az átlagos diszlokációsebesség között a mi esetünkben ($t_m \cong 0$) a

$$t_v = t_v + t_m = L/v, \quad (71)$$

míg $\dot{\epsilon}$ és v között a (22) egyenlet teremt kapcsolatot, így

$$t_v = \frac{b\varrho L}{\dot{\epsilon}}. \quad (72)$$

A (70), (68) és (72) kifejezésekből az (56)-hoz igen hasonló, attól csak egy

$$F = \frac{1}{4} \left(\frac{L}{b} \right) \left(\frac{l}{b} \right)^2 \left(\frac{\alpha c_0}{c^*} \right)^{3/2} \quad (73)$$

faktorban különböző eredmény nyerhető a fogazott folyás kezdetére:

$$F \frac{4bD_0}{l} \exp \left\{ -\frac{E_m}{kT} \right\} \varrho C_v. \quad (74)$$

(73)-ból az $l \cong (20-25)b$, $c^* \approx 1$, $c_0 = 5 \times 10^{-2}$ feltételezett értékek mellett az [51]-ben észlelt $F \cong 10^4$ teljesüléséhez az akadályok közötti átlagos távolságra $L \cong 10^3 b$ adódik. A vakanciakoncentráció-megnyúlás, valamint a diszlokációsűrűség-megnyúlás kapcsolatra egy (57), illetve (61) alakú egyenletet feltételezve, (74)-ből rendezés után ϵ_c -re az

$$\epsilon_c^{m+\beta} = \frac{1}{F} \frac{l\dot{\epsilon}}{4bKND_0} \exp \left\{ \frac{E_m}{kT} \right\} \quad (75)$$

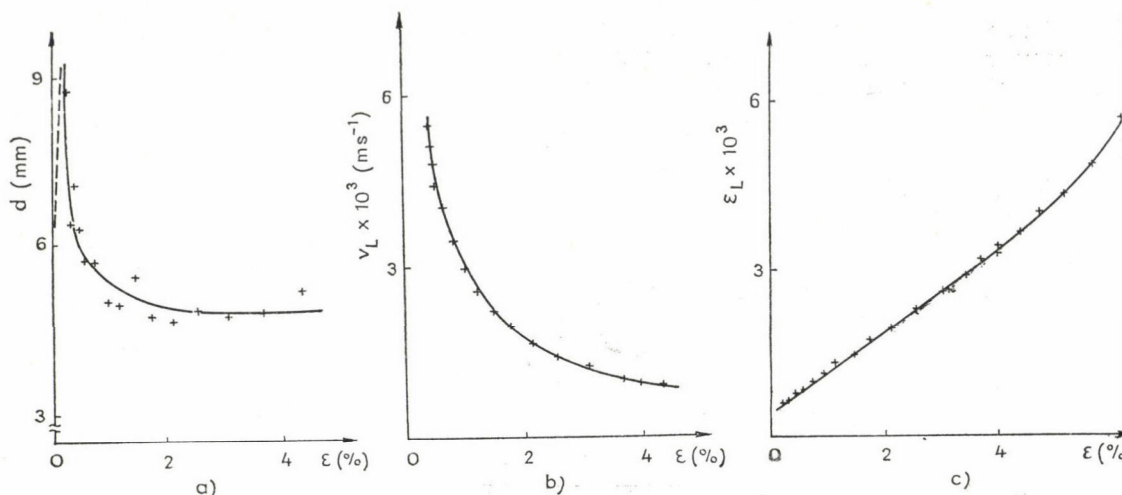
kapjuk. A *Mc Cormick*-féle sztatikus nyúlási öregedési modellből kapott fenti egyenlet (62)-höz hasonlóan számos kísérleti eredmény kiértékelésének alapjául szolgál. Ez az egyenlet ϵ_c -nek a szennyező koncentrációtól való közvetlen függését is tartalmazza (ellentétben (62)-vel), amelyet több szerzőnek a kísérleti eredményei is igazoltak [3, 36].

4.3. Lüders-sáv analízis

A (62), (75) egyenletek lehetőséget nyújtanak alkalmas kísérleti módszerek esetén az $m+\beta$ paraméter értékének meghatározására. *Mc Cormick* [2] és [53] munkáiban a Lüders-sávok vizsgálatán alapuló olyan kísérleti módszereket javasolt, amelyekből külön-külön az m , illetve β értékek megadhatók.

A 3. fejezetben megmutattuk, hogy az ϵ_L Lüders megnyúlás és a Lüders-frontban mozgó diszlokációk ϱ_L sűrűsége között az

$$\epsilon_L = b\varrho_L \left(\frac{v_L^d}{v_L} \right) \quad (76)$$



16. ábra. Sáv szélesség (a), sávsebesség (b) és Lüders-megnyúlás (c) változása a plasztikus megnyúlás függvényében [6]

kapcsolat áll fenn. A v_L és v_L^d közötti összefüggést vizsgálva Hahn [54] azt találta, hogy $v_L \cong v_L^d$ és így

$$\varepsilon_L = bw\varrho_L. \quad (77)$$

Amennyiben a diszlokációttermelődesre egy (61) alakú egyenletet tételezünk fel, ε_L -re az

$$\varepsilon_L = Nbwe^\beta \quad (78)$$

eredményt kapjuk [2]. A fenti egyenletből a Lüders megnyúlások deformáció alatti változásának ismeretében megadható β értéke.

A Lüders-sáv mozgással kapcsolatos néhány eredményt mutatnak a 16. a, b, c. ábrák egy alumíniumötvözetre (lásd még az 1. fejezetet) [6]. A sávok szélessége a deformáció kezdetén meredeken nő (szaggatott vonal), majd hirtelen csökken, és ezután az egymás után következő sávok szélessége elég gyorsan elér egy állandó értéket. A Lüders-sávok v_L terjedési sebessége a deformáció növekedésével monoton csökken, míg az ε_L és ε közötti kapcsolat igen jó közelítéssel lineárisnak tekinthető. Ezt az ε_L és ε közötti közel lineáris kapcsolatot, amelynek a $\beta \cong 1$ felel meg, egyébként többen is megfigyelték [11, 55—57] különböző ötvözeteken.

Az A típusú Lüders-sáv képződéssel járó fogak vizsgálata lehetőséget nyújt a vakanciatermelődés mértékének meghatározására is, az (57)-ben szereplő m paraméter értékének megadására [53].

Ennek az ismétlődő, szakaszos folyamának a feltétele, hogy a Lüders-sáv kiszélesedéséig szükséges t_L időtartam lényegesen hosszabb legyen, mint a (68)-ban szereplő t_a idő [9]:

$$t_L > t_a. \quad (79)$$

Tekintsünk most egy próbatestet, amelyben éppen megindult egy ilyen sáv kiszélesedése (ez többnyire a befogási pontok környékénél, a minta vállrészénél kezdődik el).

Mivel a (49)–(52) egyenletekből

$$t_L = \frac{w}{v_L} \cong \frac{\varepsilon_L}{\dot{\varepsilon}}, \quad (80)$$

így (77) segítségével a fenti egyenlet a

$$t_L = \frac{bw\rho_L}{\dot{\varepsilon}} \quad (81)$$

alakban is megadható. Ha most a Lüders-sáv elindulása után hirtelen megnöveljük az $\dot{\varepsilon}$ nyúlási sebességet, akkor ez az áthaladási idő csökkenését eredményezi. Amennyiben

$$t_L < t_a,$$

úgy az eddigi szakaszos folyás helyett a továbbiakban most már egy folytonos folyást észlelhetünk a σ – ε grafikonon (17. ábra). Feltételezve, hogy a folyásban az átmenet akkor következik be, amikor

$$t_L \cong t_a, \quad (83)$$

a t_L áthaladási időt mérve meghatározható az ismeretlen t_a időtartam. A fenti feltétel (68) és (80) segítségével az

$$\frac{\dot{\varepsilon}}{\varepsilon_L} = \varepsilon^m \left(\frac{\alpha c_0}{c^*} \right)^{3/2} \frac{KD_0 l}{b^3} \exp \left\{ -\frac{E_m}{kT} \right\} \quad (84)$$

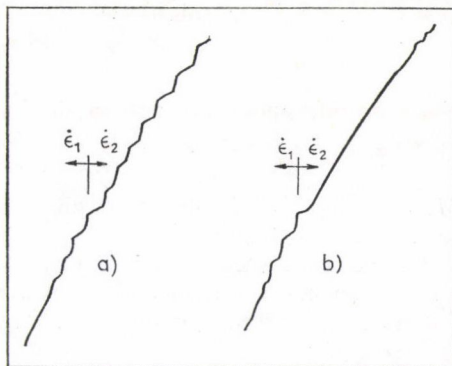
formában is felírható. Ebből az egyenletből a nyúlási sebességnek a folyás karakteristikájában okozott változását felhasználva meghatározható m értéke. *Mc Cormick* [53] Al–0,7% Mg–0,4% Si ötvözetnél az $\ln(\dot{\varepsilon}/\varepsilon_L)$ -et ábrázolva $\ln \varepsilon$ függvényében egyenest kapott, amelynek meredekségéből $m \cong 1,1$ adódott. Az előző fejezetben ismertetett módszer alkalmazásával az $m+\beta$ paraméterre pedig az $m+\beta \cong 2$ eredményt kapta ($\beta \cong 0,9$).

4.4. Néhány további módszer és eredmény

A PLE megfigyelésének kezdete óta a vizsgálatok egyik ágát képezi annak tisztázása, hogy milyen hatással van a minta szemcseszerkezete a fogazott folyásra. *Charnock* [58] Cu–Sn ötvözetnél a diszlokációttermelődést egy (61)-hez hasonló alakú

$$\varrho = N \left(\frac{\varepsilon^\beta}{d^\delta} \right) \quad (85)$$

egyenlettel vette figyelembe, ahol d az átlagos szemcseméretet jelöli, δ pedig egy állandó. Az (54) Cottrell feltételt használva adott hőmérsékletnél és nyújtási sebességnél



17. ábra. Feszültség-megnyúlás görbe, amelyen a hirtelen megnövekedett nyúlási sebesség következtében megváltozik a folyás jellege [53]
a) $\dot{\varepsilon}_1 = 2,08 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$, $\dot{\varepsilon}_2 = 2,08 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$
b) $\dot{\varepsilon}_1 = 2,08 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$, $\dot{\varepsilon}_2 = 4,16 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$

az ε_c és d közötti kapcsolatra egy

$$\varepsilon_c \sim d^{\frac{\delta}{m+\beta}} \quad (86)$$

alakú egyenlet adódik. A mérések alapján $\delta/(m+\beta) \cong 0,5$, így

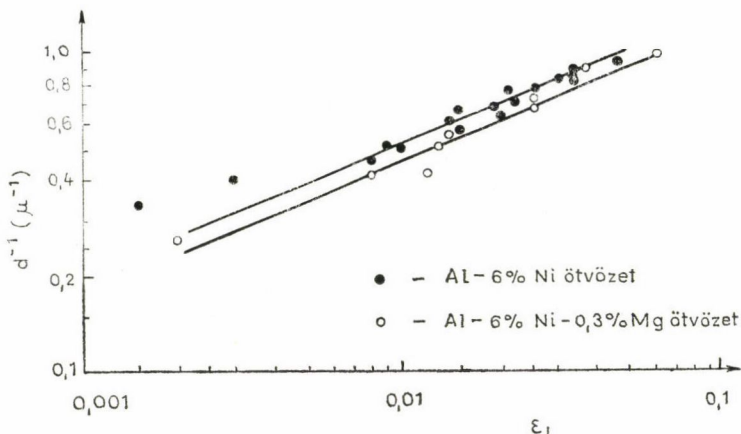
$$\varepsilon_c \sim \sqrt{d}. \quad (87)$$

Mc Cormick [59] azonban nem tapasztalt változást ε -ben különböző szemcsézett-ségű Al—Mg—Si ötvözetek esetén.

Érdemes itt megemlíteni *Lloyd* és *Morris* [60] vizsgálatának eredményét, amely a szemcseméret és Lüders megnyúlás közötti kapcsolatra vonatkozik. Kísérleteikben finomszemcsés alumíniumötvözetekre igazolták az ε_L és d között elméletileg is alátámasztható

$$\varepsilon_L \sim d^{-1} \quad (88)$$

összefüggést (18. ábra).



18. ábra. A Lüders megnyúlás függése a szemcseméret reciprokától [6]

A PLE-vel kapcsolatos további munkák közül mindenképpen figyelemre méltóak még *Mulford*nak, *Kocks*nak és *Van Den Beukel*nek a dinamikus nyúlási öregedésre vonatkozó elméleti és kísérleti eredményei [61—66], *Pink*nek és *Grinberg*nek Al—Mg ötvözetekben végzett igen részletes és alapos elemzései, amelyeket a *B* és *C* típusú fogazatot mutató folyási görbékkel kapcsolatban végeztek [67, 68]. Végül érdekesek még *Mc Cormick* [69, 79] rúd alakú Al—Mg—Si ötvözeteken, csavarási deformációval kapcsolatos PLE vizsgálata.

5. ÖSSZEFOGLALÁS

A dolgozatban a szakítási kísérletekben gyakran tapasztalható és a képlékeny alakítási technológiák szempontjából is igen fontos jelenséggel, a Portevin—Le Chatelier effektussal (PLE) foglalkoztunk, amelyre az irodalomban a fogazott folyás (serrated yielding), rázkódó folyás (jerky flow) elnevezéseket is használják. A jelenség lényegét tekintve egyfajta instabilitási probléma, amely a fémek képlékeny alakítása közben lép fel. Jellegzetessége a minta szakaszos folyásában és felkeményedésé-

ben nyilvánul meg, amely szakaszok gyakran teljesen szabálytalanul is követhetik egymást. Az effektus általában bizonyos ötvözeteknél, a nyújtási sebesség egy adott intervallumában észlelhető és nagymértékben függ a hőmérséklettől, valamint a minta hibaszerkezettől.

A dolgozat elején megismerkedtünk néhány, a problémakörrel kapcsolatos fogalommal, jelenséggel. Ezután a PLE kialakulásában alapvető szerepet játszó ponthiba-diszlokáció kölcsönhatást elemeztük. Ennek kapcsán áttekintettük a kölcsönhatásban domináló rugalmas kölcsönhatások alap típusait, majd irányított diffúzió figyelembevételével meghatároztuk a szennyező atomok diszlokációvonal menti szegregációjának időbeli lefutását. A 2.3. pontban a mozgó diszlokáció körül kialakuló Cottrell-felhő fékező hatásával foglalkoztunk. A mozgó diszlokáció szennyezők közötti kölcsönhatásnak abból a jellegzetes tulajdonságából, hogy egy kritikus sebesség felett a diszlokáció egyenletes mozgatásához szükséges feszültség csökken, magyarázat adódik a PLE-vel kapcsolatos néhány kísérletileg tapasztalható jelenségre (3. fejezet). Az utolsó fejezetben néhány, a fogazott folyással kapcsolatos kísérleti eredményt és a nyúlási öregedésre vonatkozó modellt ismertettük. Ezekből az irodalomban leginkább elterjedt Cottrell-féle dinamikus, Mc Cormick-féle sztatikus modellekből, valamint a Lüders-sávok analiziséből a plasztikus deformáció nyomán a hibaszerkezetben fellépő mennyiségi változásokra is lehet következtetni.

IRODALOM

1. A. Portevin and F. Le Chatelier, C. R. Acad. Sci. Paris, 176, 507, 1923.
2. P. G. Mc Cormick, Acta Met. 19, 463, 1971.
3. B. Russel, Phil. Mag. 8, 615, 1963.
4. J. A. Elias and R. E. Hook, Interstitial free sheet steel-applications and performance. Paper No. 720 018 presented at Automotive Engineering Congress, Detroit, January 1972. Preprint published by Society for Automotive Engineers, Inc.
5. B. W. Christ and M. L. Picklesimer, Acta Met. 22, 435, 1974.
6. M. Teresa Correia and M. A. Fortes, Scripta Met. 15, 339, 1981.
7. M. Teresa Correia and M. A. Fortes, Mat. Sci. and Engineering, 54, 95, 1982.
8. A. J. Thomas, Acta Met. 14, 1363, 1966.
9. J. Friedel, Dislocations, Addison-Wesley, London, 1967. p. 413.
10. A. H. Cottrell, Vacancies and Other Point Defects in Metals and Alloys, Institute of Metals, London, 1958. p. 1.
11. R. K. Ham and D. Jaffrey, Phil. Mag. 15, 247, 1967.
12. P. G. Mc Cormick, Acta Met. 20, 351, 1972.
13. A. H. Cottrell, Dislocations and Plastic Flow in Crystals, Clarendon Press, Oxford, 1953.
14. Kovács I. és Zsoldos L., Diszlokációk és képlékeny alakváltozás, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1965. 164. o.
15. Kovács I, Magyar Fizikai Folyóirat, 18, 1, 1970.
16. H. Stehle und A. Seeger, Z. Physik, 146, 217, 1956.
17. R. L. Fleisher, Acta Met. 11, 203, 1963.
18. I. Saxl, Czech. J. Phys. B14, 381, 1964.
19. J. W. Christian, The Interactions between Dislocations and Point Defects, ed. B. L. Eyre, Vol. III, A.E.R.E. Harwell, 1968. p. 604.
20. P. M. Hazzledine, The Interactions between Dislocations and Point Defects, ed. B. L. Eyre, Vol. III, A.E.R.E. Harwell, 1968. p. 723.
21. I. Kovács, Arch. Mech. 33, 901, 1981.
22. A. H. Cottrell and B. A. Bilby, Proc. Phys. Soc. A. 62, 49, 1949.
23. B. J. Ljubov, Diffuzionnnye processy v nyeodnorodnyh tvjordyh szredah, Moszkva, Nauka, 1981.
24. F. C. Larché, Dislocations in Solids, ed. F.R.N. Nabarro, North-Holland Publishing Company. Amsterdam, Vol. 4. 1979. p. 148.
25. R. W. Baluffi and D. N. Seidmann, Phil. Mag. 843, 1968.
26. A. H. Cottrell and M. A. Jaswon, Proc. Roy. Soc. A, 199, 104, 1949.
27. J. P. Hirth and J. Lothe, Theory of Dislocations, McGraw-Hill, New York, 1968.
28. S. Takeuchi and A. S. Argon, Phil. Mag. 40, 65, 1979.
29. H. Yoshinaga and S. Morozumi, Phil. Mag. 23, 1367, 1971.
30. W. Räuchle, O. Vöhringer und E. Macherauch, Mat. Sci. and Engineering, 12, 147, 1973.
31. W. Sylvestrowich and E. O. Hall, Proc. Phys. Soc. B, 64, 495, 1951.

32. A. H. Cottrell, *Phil. Mag.* 44, 829, 1953.
33. H. G. Van Bueren, *Acta Met.* 3, 519, 1955.
34. G. Saada, *Electron Microscopy and Strength of Crystals*, edited by G. Thomas and J. Washburn, Interscience, New York, 1963. p. 651.
35. M. D. Merz, Ph. D. Thesis, Stanford University, 1967.
36. A. Wijler, M. M. A. Vrijhoef and A. Van Den Beukel, *Acta Met.* 22, 13, 1974.
37. M. C. Chaturvedi and D. J. Lloyd, *Phil. Mag.* 30, 1199, 1974.
38. R. Lagneborg and B. H. Forsen, *Acta Met.* 21, 781, 1973.
39. Y. Bergström and W. Roberts, *Acta Met.* 19, 1243, 1971.
40. K. Matsuura, T. Nishiyama and S. Koda, *Trans. J. I. M.*, 10, 429, 1969.
41. P. G. Mc Cormick, *Scripta Met.* 6, 165, 1972.
42. D. J. Lloyd, D. W. Chung and M. C. Chaturvedi, *Acta Met.* 23, 93, 1975.
43. D. J. Lloyd, *Scripta Met.* 8, 1025, 1974.
44. J. P. Hirth and J. Weertman (editors), *Workhardening*, Met. Soc. Conf. Gordon and Breach, 1968.
45. Vörös Gy. és Kovács I., Szilárdságnövelő mechanizmusok fémekben, *Magyar Fizikai Folyóirat*, 29, 201, 1981.
46. Z. S. Basinski and S. Saimoto, *Canad. J. Phys.* 45, 1161, 1967.
47. D. Tseng, M. Sc. Thesis, Univ. of Manitoba, 1974.
48. O. Vöhringer and E. Macherauch, *Z. Metallk.* 58, 317, 1967.
49. D. Munz and E. Macherauch, *Z. Metallk.* 57, 552, 1966.
50. F. A. Mohamed, K. Linga Murty and T. G. Langdon, *Acta Met.* 22, 325, 1974.
51. P. G. Mc Cormick, *Acta Met.* 20, 351, 1972.
52. A. W. Sleeswyk, *Acta Met.* 6, 598, 1958.
53. P. G. Mc Cormick, *Acta Met.* 22, 489, 1974.
54. G. T. Hahn, *Acta Met.* 10, 727, 1962.
55. A. J. R. Soler-Gomez and W. J. McG. Tegart, *Phil. Mag.* 20, 495, 1969.
56. C. N. Reid, A. Gilbert and A. R. Rosenfield, *Phil. Mag.* 12, 409, 1965.
57. A. Wijler, J. Schade van Westrum and A. Van Den Beukel, *Acta Met.* 20, 355, 1972.
58. W. Charnock, *Phil. Mag.* 18, 89, 1968.
59. P. G. Mc Cormick, *Phil. Mag.* 23, 949, 1971.
60. D. J. Lloyd and L. R. Morris, *Acta Met.* 25, 857, 1977.
61. R. A. Mulford and U. F. Kocks, *Scripta Met.* 13, 729, 1979.
62. R. A. Mulford and U. F. Kocks, *Acta Met.* 27, 1125, 1979.
63. R. A. Mulford, *Met. Trans. A.* 10A, 1527, 1979.
64. P. Wycliffe, U. F. Kocks and J. D. Embury, *Scripta Met.* 14, 1349, 1980.
65. A. Van Den Beukel, J. Blonk and G. H. Van Haastert, *Acta Met.* 31, 69, 1983.
66. A. Van Den Beukel and U. F. Kocks, *Acta Met.* 30, 1027, 1982.
67. E. Pink and A. Grinberg, *Acta Met.* 30, 2153, 1982.
68. E. Pink and A. Grinberg, *Strength of Metals and Alloys*, ed. C. Gifkins, Int. Conf. on the Strength of Metals and Alloys, Melbourne, Vol. I. 1982. p. 83.
69. P. G. Mc Cormick, *Scripta Met.* 15, 441, 1981.
70. P. G. Mc Cormick, *Acta Met.* 30, 2079, 1982.

9. NAGYSEBESSÉGŰ KÉPLÉKENY ALAKVÁLTOZÁSOK

VÖRÖS GYÖRGY

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOM

1. Bevezetés	509
2. Dinamikus térkép	510
3. Diszlokációmozgás viszkózus fékező mechanizmusai	511
3.1. Diszlokációk relativisztikus tulajdonságai	511
3.2. Diszlokációmozgást fékező mechanizmusok	514
3.2.1. Termikus fonon szóródás	514
3.2.2. Termoelasztikus fékeződés	515
3.2.3. Ponthiba keltés, mint fékező erő	516
4. Plasztikus hullámok	516
4.1. A plasztikus hullámok sebessége és az alakítási görbe közötti kapcsolat	517
4.2. A plasztikus hullámok és diszlokációmozgás közötti összefüggés	518
5. Összefoglalás	520
Irodalom	520

1. BEVEZETÉS

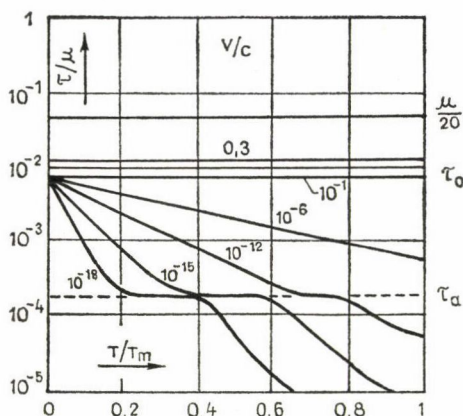
A fémekből készült munkadarabok előállítása során az anyag több-kevesebb maradandó alakváltozást szenved. Ezen alakváltozás létrehozásához munkát kell végeznünk. A modern technológiák egyre nagyobb sebességű alakítási folyamatokat alkalmaznak, amely során az alakváltoztatáshoz szükséges munka nagysága, a folyásfeszültség és az alakítási keményedési folyamatok erős sebességfüggése miatt, erőteljesen növekszik. Ezt a hatást lassú alakítás esetében a hőmérséklet növeléssel ellensúlyozni lehet, de bizonyos alakítási sebesség felett a hőmérséklet hatása jelentéktelenné válik. A deformáció sebességének további növelése, gazdaságos gyártási folyamatokat feltételezve, megkívánja, hogy megismerjük a nagysebességű alakváltozások esetén működő alakítási keményedést okozó mechanizmusokat és ha lehet hatásukat csökkentjük. A rugalmas alakváltozás terjedési sebessége a hangsebesség, míg a plasztikus alakváltozásé, szélsőséges esetektől eltekintve, ennél jóval kisebb. Ennek oka, mint látni fogjuk, szintén az alakítási görbe meredekségének változásában keresendő.

Az alakváltozások sebességének érzékeltetése céljából tekintsünk egy hagyományos szakító vizsgálatot. Legyen a próbatest hossza 10 cm, a keresztfejsebesség 0,5 cm/perc. Ekkor a deformáció sebességére $\dot{\epsilon} \sim 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ adódik. Húzásnál, hengerlésnél $\dot{\epsilon} \gg 10^{-3} \text{ s}^{-1}$, míg a nagysebességű alakítások esetében $\dot{\epsilon} \gg 10^3 \text{ s}^{-1}$. Az utóbbi években a kísérleti vizsgálatokban alkalmazott deformáció sebességek már meghaladták a 10^5 s^{-1} -t.

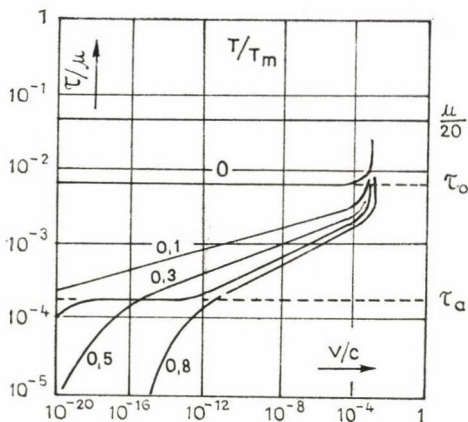
2. DINAMIKUS TÉRKÉP

Az 1., 2. ábrák szemléltetik a folyásfeszültség, deformációsebesség és a T_m olvadáspontonra redukált hőmérséklet közötti összefüggést. Az ilyen típusú grafikont Ashby nyomán [1] dinamikus térképnek nevezzük. A két ábrán az eredeti Ashby térkép általánosított változata látható [2]. Mindkét ábra tiszta alumíniumra vonatkozó mérési eredményeket tartalmaz. Az Al mintákban a diszlokáció sűrűség $\rho \approx 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ volt. A $\dot{\gamma}$ deformációsebesség és a diszlokációk v sebessége között a b Burgers-vektor felhasználásával a szokásos

$$\dot{\gamma} = \rho b v \quad (1)$$



1. ábra. Folyásfeszültség hőmérsékletfüggése tiszta alumíniumban különböző deformáció sebességeknél



2. ábra. Folyásfeszültség deformáció sebesség kapcsolat tiszta alumíniumban különböző hőmérsékleteken

összefüggést használták fel [3]. Az 1. ábrán a τ nyírófeszültségnek a μ nyírási modullal normált értékeit ábrázoltuk a redukált hőmérséklet függvényében, míg paraméter a diszlokáció sebesség c hangsebességgel osztott értéke. Az ábrán bemutatott görbék négy jellemző részre tagolhatók. Az első rész, amely fémek esetében általában $0,5 T_m$ hőmérséklet felett és alacsony feszültségen mérhető, tiszta kúszási deformáció [1, 4]. Ezt a folyamatot diffúzió kontrollálja, s nagysebességű alakításoknál nincs jelentősége. Ha a hőmérséklet csökkentésével, vagy a deformációsebesség emelésével növeljük a feszültséget, akkor egy jó közelítéssel hőmérsékletfüggetlen szakaszhoz érünk. Ezen feszültség értékét az ábrán τ_a -val jelöltük. A hőmérsékletfüggetlen szakasz megjelenésének magyarázata a következő. Ebben a szakaszban a feszültség már elegendő a diszlokációk mozgására a csúszásukat akadályozó hosszútávú belső feszültségtér ellenében is. Az ilyen akadályok legyőzésében a hőmérsékletnek nincs nagy szerepe, mivel a kT energia, amely véletlen fluktuációkból rendelkezésre áll, sokkal kisebb, mint az akadály leküzdéséhez szükséges szabadenergia. Tovább növelve a feszültséget, a diszlokációk mozgását a rövid hatótávolságú akadályok fogják fékezni. Ezen akadályokon való áthaladáshoz szükséges energia nagysága már összemérhető a kT termikus energiával, így ebben a tartományban jelentős hőmérsékletfüggést tapasztalunk. E tartományban a legegyszerűbb esetben

a deformáció sebesség és a feszültség között a következő összefüggés adható meg:

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_0 e^{-\frac{v^*(\tau_0 - \tau)}{kT}}, \quad (2)$$

ahol $\dot{\gamma}_0$, τ_0 és v^* az akadályra jellemző állandók. A (2)-ben szereplő állandók feszültség függetlenségének feltételezése szoros értelemben csak a Seeger-féle diszlokációs modell [5] esetében helytálló. Más bonyolultabb akadályok, például Peierls feszültség, keresztcsúszás, oldott atom jelenléte esetében [3], az aktiválási energia feszültségfüggő lehet, így a (2) egyenletben a kitevő nem-lineárisává válik. Ha az alkalmazott feszültség eléri az akadály erősségét jellemző τ_0 értéket, akkor a diszlokációk már termikus aktiválás nélkül is átjutnak rajta. Ebben a negyedik tartományban a diszlokációk mozgását új mechanizmusokból származó erők fékezik, amelyek hatását a viszkozitásra emlékeztető formulával írhatjuk le:

$$\tau = \alpha(T)\dot{\gamma}; \quad \alpha = \frac{B(T)}{\rho b^2}. \quad (3)$$

A (3) kifejezésből látható, hogy ha a fékező mechanizmusra jellemző B értéke kicsi, akkor a diszlokációk nagyon nagy sebességre gyorsulhatnak fel. Ha a nyíró feszültséget a diszlokáció sebességének függvényében ábrázoljuk (2. ábra), akkor kitűnik, hogy a feszültség a viszkozus tartományban ($\dot{\gamma} > 10^{-4}$ vagy $\dot{\epsilon} > 10^3$) nagyon meredeken emelkedik, nagyon kis hőmérséklet függés mellett. A feszültség növelésének végső határa az 1., 2. ábrákon bejelölt $\mu/20$ nagyságú elméletileg megbecsült feszültség, amelynek elérése az atomok között működő kötőerők elszakítását jelentené. Ehhez a feszültségértékhez közeledve a mozgó diszlokációk relativisztikus tulajdonságai lesznek jelentősek.

A következőkben áttekintünk néhány viszkozus hatást eredményező mikro-mechanizmust, amelyhez azonban szükségünk lesz a nagysebességű diszlokációk tulajdonságainak vázlatos ismertetésére.

3. DISZLOKÁCIÓMOZGÁS VISZKÓZUS FÉKEZŐ MECHANIZMUSAI

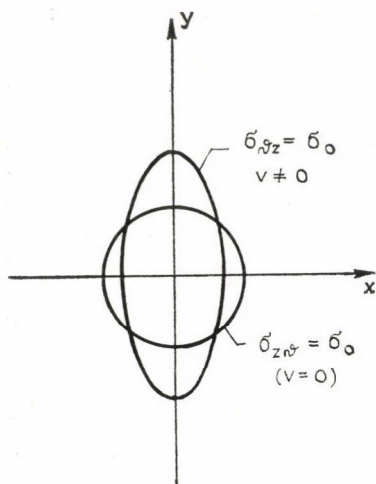
3.1. Diszlokációk relativisztikus tulajdonságai

Legyen egy csavardiszlokáció a koordináta rendszerük z tengelyével párhuzamosan és mozogjon a diszlokáció v sebességgel az x tengely mentén. Ekkor, hasonlóan a sztatikus esethez, csak a w , a z irányú elmozdulás vektor komponens nem lesz zérus [3]. Erre az elmozdulástér komponensre a következő mozgásegyenlet állítható fel [6]:

$$\Delta w - \frac{1}{c_t^2} \partial_t \partial_t w = 0, \quad (4)$$

ahol Δ a síkbeli Laplace-operátor és c_t a transzverzális hangsebesség. Bevezetve az x koordinátára a következő transzformációt

$$x^* = \frac{x - vt}{\left(1 - \frac{v^2}{c_t^2}\right)^{1/2}} = \frac{x - vt}{\beta} \quad (5)$$



3. ábra. Nyugvó és mozgó csavardiszlokáció feszültségtere

tengelye merőleges a mozgás irányára, azaz a mozgó csavardiszlokáció feszültségtere Lorentzkontrakciót szenved (3. ábra).

A deformációs tér felhasználásával meghatározható a diszlokáció E_1 potenciális energiája, amelyre a következő adódik:

$$E_1 = E_0 \frac{1 - \frac{v^2}{2c_t^2}}{\left(1 - \frac{v^2}{c_t^2}\right)^{1/2}}. \quad (8)$$

Az $1/2 \rho (\partial_t w)^2$ kifejezés egész térre vett integrálásával a diszlokáció kinetikus energiáját állíthatjuk elő, amely a következő eredményre vezet:

$$E_2 = \frac{E_0 v^2}{2c_t^2 \left(1 - \frac{v^2}{c_t^2}\right)^{1/2}}. \quad (9)$$

A (8), (9) kifejezésekben E_0 a nyugvó diszlokáció energiáját jelöli, míg ρ az anyag sűrűsége. A teljes energiát E_1 és E_2 összegzésével kapjuk meg:

$$E = \frac{E_0}{\left(1 - \frac{v^2}{c_t^2}\right)^{1/2}}. \quad (10)$$

A teljes energia kifejezésből azonnal következik, hogy egy nagy sebességgel mozgó diszlokáció energiája és ezzel együtt a vonalmenti feszültsége a hangsebességhez közeledve divergál.

a (4) mozgásegyenlet az egyensúlyi egyenletnek megfelelő alakba írható át:

$$\partial_{x^*} \partial_{x^*} w + \partial_y \partial_y w = 0. \quad (6)$$

Ennek megoldása legcélszerűbben polárkoordinátákban történhet. Az elmozdulás ismeretében a feszültségtér is előállítható, amelynek egyetlen el nem tűnő tagja így adható meg

$$\sigma_{yz} = \sigma_{zy} = \frac{\mu b}{2\pi r} \frac{\beta}{\cos^2 \vartheta + \beta^2 \sin^2 \vartheta}, \quad (7)$$

ahol

$$r^2 = (x - vt)^2 + y^2; \quad \tan \vartheta = \frac{y}{x - vt}$$

mennyiségeket jelöli. Érdeemes megemlíteni, hogy a nyugvó csavardiszlokáció feszültségterében egy adott σ_0 érték egy, az origó köré írt kör mentén lép fel, míg a mozgó esetben a σ_0 értékeket egy ellipszis mentén találjuk meg. Az ellipszis nagy

Lehetséges a mozgó diszlokációhoz tömeget rendelni következőképpen. A (10) kifejezést v^2 szerint sorbafejtve közelítőleg írhatjuk, hogy

$$E \approx E_0 + \frac{1}{2} E_0 \frac{v^2}{c_t^2}. \quad (11)$$

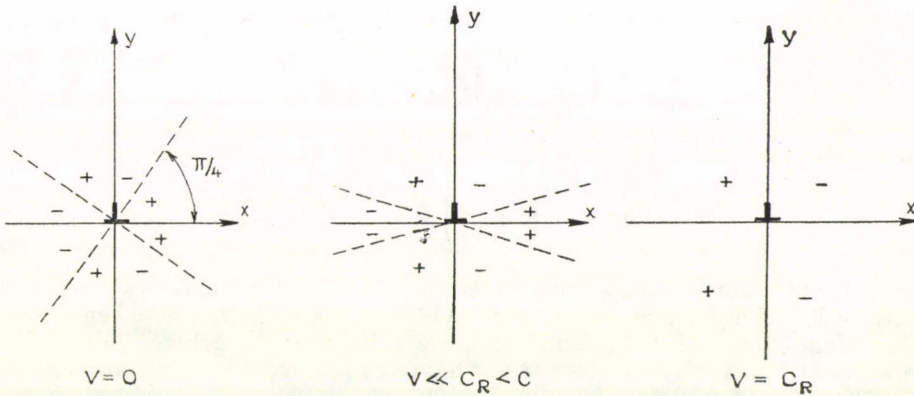
Ha most itt a második tagot $1/2 m_0 v^2$ alakban írjuk fel, akkor m_0 -ra az

$$m_0 = \frac{E_0}{c_t^2} \quad (12)$$

összefüggés adódik. Ezt a (10) energia kifejezésbe helyettesítve a relativitás elméletből ismert formulát nyerjük:

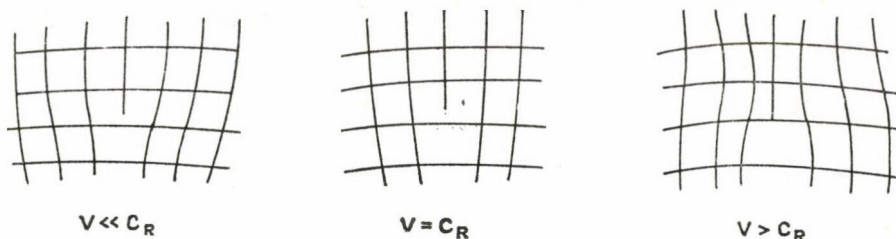
$$E = \frac{m_0 c^2}{\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{1/2}} = mc^2, \quad (13)$$

ahol most c a transzverzális hangsebesség.



4. ábra. Nyugvó, a Rayleigh-sebességnél kisebb és a Rayleigh-sebességgel mozgó éldiszlokáció feszültségterének σ_{xy} komponense

A koordináta rendszer tengelyével párhuzamosan mozgó éldiszlokáció feszültségterét lényegesen bonyolultabb kifejezések adják meg, mivel az elmozdulás tér több komponense nem zérus [6]. Az éldiszlokáció egy lényeges tulajdonságát, amellyel a csavardiszlokáció nem rendelkezik, a számítások elvégzése helyett a 4. ábrán érzékeltetjük. Az éldiszlokáció σ_{xy} feszültségtenzor komponensét ábrázoltuk három különböző sebesség esetén a síkbeli x, y koordináta rendszerben. Az ábrákon szereplő + és - jelek a komprimált és dilatált zónákat jelölik. Nyugvó esetben ($v=0$) ezen tartományokat 45° -os egyenesek választják el egymástól. Növelve a diszlokáció sebességét ($v \ll c$) az elválasztó egyenesek elfordulnak és az x tengely felé közelednek. Elérve a c_R Rayleigh-féle felületi hullámok sebességét, az egyenesek egybeesnek az x -tengellyel ($c_R \sim 0,9 c_t$). Hasonló tulajdonságot mutatnak a feszültségtenzor többi komponensei is, amelyekből pl. olyan különleges hatások következnek, hogy a nagy



5. ábra. A rácssíkok torzulása három különböző sebességgel mozgó éldiszlókáció esetén

sebességgel egyirányban mozgó éldiszlókációk között vonzó kölcsönhatás keletkezik [6]. A c_R sebesség felett az éldiszlókáció elmozdulás tere is jelentősen megváltozik. Az 5. ábrán a rácssíkok torzulását ábrázoltuk egy betoldott többlet rácssík környezetében. Látható, hogy $v < c_R$ esetén a dilatált zónák a többlet fél-sík két oldalán helyezkednek el, míg $v = c_R$ -nél az eredeti rácssíkok „kisimulnak” és $v > c_R$ esetben a dilatált zónákat a többlet fél-sík éle alatt találhatjuk meg. Ez tulajdonképpen azt jelenti, hogy a diszlókáció Burgers-vektora „előjelet” vált [7]. Hasonlóan mint csavardiszlókáció esetén, meghatározhatjuk az éldiszlókáció teljes energiáját:

$$E = E_0 \left(\frac{1}{\beta^3} - \frac{17}{2\beta} \right), \quad \beta = \left(1 - \frac{v^2}{c_t^2} \right)^{1/2}, \quad (14)$$

valamint definiálhatjuk a diszlókáció tömegét is.

$$m = m_0 \left(1 + \frac{c_t^4}{c_\lambda^4} \right), \quad m_0 = \frac{E_0}{c_t^2}, \quad (15)$$

ahol c_λ a longitudinális hanghullámok sebessége. A (14), (15) kifejezésekben E_0 a csavardiszlókáció nyugalmi energiáját jelenti. (14)-ből látszik, hogy ez esetben is végtelenhez tart az energia, ha v közeledik a transzverzális hangsebességhez.

3.2. Diszlókációmozgást fékező mechanizmusok

Ebben a fejezetben három különböző típusú fékező mechanizmust ismertetünk, amelyek következtében a kristályban mozgó diszlókációk véges feszültség hatására nem érhetik el a hangsebességét.

3.2.1. Termikus fonon szóródás

A Leibfried által részletesen vizsgált mechanizmus röviden a következőképpen foglalható össze [8]. A kristályban mozgó diszlókáció tulajdonképpen izotrop fluxusú hanghullámokon keresztül mozog. A hanghullámok szóródnak a többi diszlókációkon, így egy fékező erő jelenik meg, amely arányos lesz a mozgó diszlókáció sebességével. A hanghullámok a kristály átlagos termikus energiáját adó termikus fononokhoz hasonló alakban vannak jelen. Eshelby mutatta meg, hogy ez a csillapítási mechaniz-

mus teljesen analóg egy állandó fluxusú mágneses térben mozgó elektron esetével [9, 10]. Más megfogalmazásban azt is mondhatjuk, hogy a kristály egyenletesen eloszló fononjai ütköznek a diszlokációt leíró lokálisan kondenzálódott fononokkal [11]. Mozgó diszlokáción a szórásból származó erőhatás már nem hengerszimmetrikus. A részletes számításokból az alkalmazott feszültség és a sebesség között a következő kapcsolat adódik:

$$v = 10c\sigma b^3/3kT; \quad (16)$$

amelyben b a Burgers-vektort, T az abszolút hőmérsékletet jelöli. Réz esetében szoba-hőmérsékleten a v/c és σ értékek között az 1. táblázatban bemutatott eredmények adódnak.

1. TÁBLÁZAT

A v sebességgel mozgó diszlokáció mozgatásához szükséges feszültség fonon szóródás esetén

v/c	σ (MPa)
0,01	0,8
0,1	8,0
0,5	40
1,0	80

2. TÁBLÁZAT

Termoelasztikus fékező mechanizmus esetén érvényes diszlokáció sebesség-feszültség kapcsolat számszerű értékei

v/c	σ (MPa)
0,01	0,013
0,1	0,13
0,5	0,6
1,0	1,3

3.2.2. Termoelasztikus fékeződés

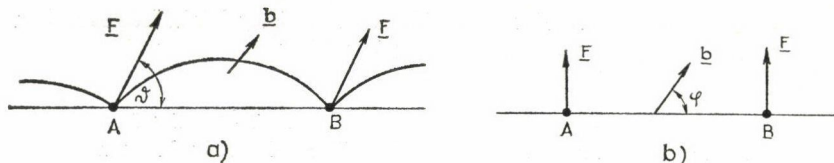
A kristály a benne haladó nagy sebességű éldiszlokáció deformációs tere révén erősen inhomogén hőmérsékletűvé válik. Ennek következtében egy irreverzibilis hőáram indul meg, amely a hőmérsékleti gradienst csökkenteni igyekszik. Ez az áram a termoelasztikus hatáson keresztül fékezi a diszlokációt [10]. A meglehetősen bonyolult számításokból a következő összefüggés adódik az elérhető sebesség és az alkalmazott feszültség között

$$v \cong \frac{60K\sigma}{\mu b \varrho} \left[\frac{T}{10\mu} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)^2 - (C_p - C_v) \ln \left(\frac{KR}{C_p \varrho b^2 v} \right) \right]^{-1}, \quad (17)$$

ahol K a hővezetési együttható, C_p és C_v az állandó nyomáson és térfogaton vett fajhők, μ a nyírási modulusz, ϱ az anyag sűrűsége. Csavardiszlokációra (17)-hez hasonló eredmény adódik, csak a logaritmus tag előtt egy 10-es szorzófaktor áll. Szobahőmérsékletet feltételezve, rézre a 2. táblázat adja meg a feszültség-sebesség kapcsolatot.

3.2.3. Ponthiba keltés mint fékező erő [12]

Mozogjon egy diszlokáció 6a. ábrának megfelelően a rajz síkjában és tartalmazzon az A és B pontoknál a csúszósíkra merőleges két lépcsőt [3]. A lépcsők nyilvánvalóan tiszta éldiszlokációk. Lassú sebesség esetén a lépcsők közötti diszlokáció szakaszok az alkalmazott feszültség hatására kihajlanak és megjelenik az A , B pontokban egy-egy erő, amelyek a lépcsőt a Burgers-vektor irányában konzervatív mozgásra



6. ábra. Az A és B pontoknál lépcsőt tartalmazó diszlokáció mozgása kis sebességnél (a), valamint hangsebességhez közeli sebességnél (b)

készítetik. Így a lépcsők követni tudják a diszlokációt. Lényegesen megváltozik a helyzet akkor, ha a diszlokáció nagy sebességgel mozog (6b. ábra). Ekkor, mint láttuk, az energiája divergál és ezzel együtt a vonalmenti feszültsége is. Ennek az lesz a következménye, hogy a diszlokáció alig, vagy egyáltalán nem hajlik ki az AB pontok környezetében. A lépcsőkre ható erő most merőleges a diszlokáció vonalra. Ezen erők hatására a lépcsők most is csak b irányban mozdulhatnak el. Ha azonban a diszlokáció sebessége elég nagy, akkor a lépcsők csak akkor tudnák követni, ha sebességük nagyobb lenne mint a hangsebesség. Ez azonban közönséges diszlokációk esetében nem következhet be, ezért a lépcsők szükségképpen csak nem-konzervatív mozgással, azaz ponthiba termeléssel mozdulnak el. Ha a diszlokációvonal mozgásának iránya és Burgers-vektor által bezárt szöget φ -vel, egy ponthiba képződési energiáját e -vel és a hosszegységre eső lépcsők számát n -nel jelöljük, akkor az egyenletes sebesség fenntartásához a

$$\sigma = en \frac{\sin \varphi}{b^2} \quad (18)$$

nagyságú átlagos feszültség szükséges. Pl. $e \sim 1$ eV, $\sin \varphi \sim 1$ és $n = 10^5/\text{cm}$ esetén σ -ra 22 MPa feszültség adódik.

4. PLASZTIKUS HULLÁMOK

A nagysebességű alakítási kísérleteket általában a vizsgálandó anyagból készült mintadarab és egy nagykeménységű fémrúd ütköztetése segítségével vizsgáljuk [13, 14]. Az ütközés pillanatában a mintában rugalmas hullámok keletkeznek, amelyek hangsebességgel terjednek tovább. Az ütközés azonban plasztikus alakváltozást is létrehoz, amelyek sebessége lényegesen kisebb, mint az őket megelőző rugalmas hullámoké. A plasztikus hullámok sebessége az alakítási keményedési görbétől függ. Előfordulhat az az eset is, hogy az ütközés pillanatában és helyén a minta anyagi részecskéi nagyobb sebességgel mozdulnak el, mint amelyet a benne létező legnagyobb sebesség megenged. Ezt az esetet nevezzük szuperszonikus alakváltozásnak és megjelenését instabilitási jelenségek kísérik [15].

4.1. A plasztikus hullámok sebessége és az alakítási görbe közötti kapcsolat

Az alakítás során kialakuló plasztikus hullámok sebességét legegyszerűbben a következőképpen határozhatjuk meg [16]. Tekintsük egy egységnyi keresztmetszetű rúd Δx szélességű darabját, amely a $t=0$ időpillanatban az x helyen helyezkedik el. Az alakváltozás során a kiválasztott Δx szelet deformálódik, szélessége $\Delta x'$ lesz és a t időpillanatban az $x + \xi$ helyre kerül. Ekkor az x helyhez tartozó deformáció az

$$\varepsilon = \frac{\partial \xi}{\partial x} \quad (19)$$

és a sebesség az

$$u = \frac{\partial \xi}{\partial t} \quad (20)$$

kifejezésekkel adható meg. A térfogatelem mozgásegyenlete a

$$\varrho \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial \sigma}{\partial x} = \frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} \quad (21)$$

formájú lesz. Felírható még továbbá a (19, 20) kifejezések felhasználásával a

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial x} \quad (22)$$

összefüggés is. A (21) mozgásegyenletben a σ feszültség ε deformáció szerinti differenciálhányadosa a nagysebességű alakítási keményedési görbére jellemző és jelöljük $F'(\varepsilon)$ -val. A (21) egyenletet deriváljuk x -szerint, a (22)-t t -szerint, majd kiküszöbölve az u mennyiséget a következő hullámegyenletet nyerjük:

$$\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial x^2} - \frac{\varrho}{F'(\varepsilon)} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial t^2} = 0. \quad (23)$$

Az így kapott hullámegyenletben az időderivált együtthatója játssza formálisan a sebesség-négyzet szerepét. Látható, hogy minden ε deformációhoz más terjedési sebesség tartozik. A (23) nem-lineáris egyenlet megoldása egy, az x -tengelyben fekvő rúd esetében könnyen meghatározható. A rúd egyik végét az $\varepsilon = \sigma(t)$ monoton növekvő függvény szerint deformáljuk. Ekkor az

$$x = \sqrt{\frac{F'(\varepsilon_0)}{\varrho}} (t - t_0); \quad \varepsilon_0 = \sigma(t_0) \quad (24)$$

kifejezés megadja, hogy a t időpillanatban, mely x helyen lesz a deformáció ε_0 nagyságú.

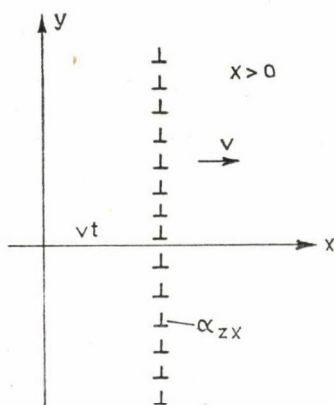
Látható, hogy a plasztikus alakváltozás terjedési sebességét vizsgálva, információt nyerünk az alakítási keményedési görbére vonatkozólag.

A plasztikus hullámok terjedésének vizsgálata technikai szempontból is fontosá vált a lökéshullámokkal szemben ellenálló tengeralattjáró testek kifejlesztésében. Továbbá, az ütközés során jó energia-elnyelő tulajdonságú autókarosszériák, valamint a meteorit szemcsék ütközésével szemben ellenálló műhold szerkezetanyagok tervezésénél, kiválasztásánál jutnak még fontos szerephez.

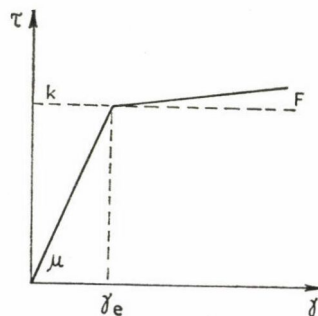
4.2. A plaztikus hullámok és diszlokáció mozgás közötti összefüggés

A plaztikus hullámok terjedését leírhatjuk a diszlokációk kontinuum modelljének felhasználásával is [17]. Ezen leírási módhoz fel kell használnunk a 3. fejezetben megismert nagysebességű diszlokációk tulajdonságait. Az előző példához hasonlóan, az egyszerűség kedvéért csak egydimenziós deformációt vizsgálunk. Töltsé ki az $x \geq 0$ féltérrel a vizsgálandó anyag (7. ábra), és alkalmazzunk a felületén ($x=0$ sík) egy $\tau_{xy}=\tau_1$ nyírófeszültséget, amely $\gamma_{xy}=\gamma_1$ nyírási deformációt hoz létre. A plaztikus alakváltozást úgy vehetjük figyelembe, hogy megjelenik az anyagban egy az x tengely irányában mozgó, az $x=0$ síkkal párhuzamos síkban elrendezett éldiszlokáció fal, amelyet az α_{zx} diszlokációsűrűség tenzorral írhatunk le. Az eloszlás legyen olyan, hogy az y tengellyel párhuzamos hosszegységre a teljes Burgers-vektor legyen b . Az α_{zx} sűrűségű diszlokációk mozgása a plaztikus alakváltozás tovaterjedését jelenti. A feladat abban áll, hogy adott alakítási keményedés esetén meg kell határoznunk a diszlokáció fal sebességét. A fal két oldalán kialakuló feszültségtér a következő lesz [6]:

$$\tau_{xy} = \pm \frac{\mu b^2 v^2}{2c^2} \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1}; \quad c^2 = \frac{\mu}{\rho}. \quad (25)$$



7. ábra. Az α_{zx} diszlokáció eloszlást reprezentáló mozgó diszlokáció fal



8. ábra. Lineáris alakítási keményedési görbe

A + előjel az $x < vt$, a - előjel az $x > vt$ tartományokban érvényes. Abban az anyagrészben, amelyen a diszlokáció fal már áthaladt, $\gamma_{xy}^p = b$ plaztikus alakváltozás jön létre. Az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy az alakítási keményedés lineáris (8. ábra):

$$\tau = \mu \gamma_e + F(\gamma - \gamma_e), \quad (26)$$

ahol γ_e a maximális rugalmas deformációt jelöli, F a keményedés mértéke. A külső τ_1 feszültség megjelenése után az anyag, a kialakuló belső feszültségek eloszlása szem-

pontjából három tartományra osztható. Az elsőben, ahol a rugalmas deformáció felül megjelenik az áthaladt diszlokáció fal feszültségtete is

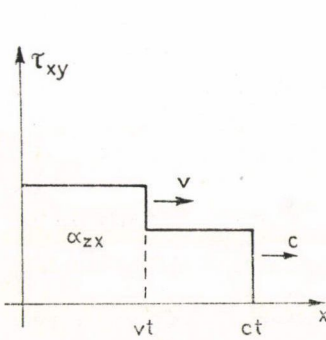
$$\tau_1 = \tau_{xy} = \mu\gamma_e + \frac{\mu b^2 v^2}{2c^2} \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1}; \quad 0 \leq x \leq vt \quad (27)$$

feszültség lesz jelen. A másodikban csak a legnagyobb nagyságú rugalmas deformáció lehet jelen, mivel ennél nagyobb feszültség megjelenése már plasztikus alakváltozást igényel, de a diszlokáció még csak $x = vt$ távolságig jutott, így

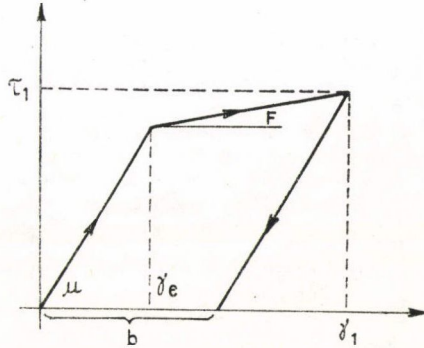
$$\tau_{xy} = \mu\gamma_e = k; \quad vt < x \leq ct. \quad (28)$$

A harmadik, legtávolabbi zónában a feszültség zérus, mivel ide még a rugalmas hullámok sem jutottak el, azaz

$$\tau_{xy} = 0; \quad x > ct. \quad (29)$$



9. ábra. Az x -tengely irányában v sebességgel mozgó diszlokáció fal által létrehozott feszültség eloszlás



10. ábra. A $\gamma_1^p = b$ maradó alakváltozás létrehozásához szükséges feszültség meghatározásához

A kialakult feszültségállapotot a 9. ábrán tüntettük fel. Tudjuk, hogy a plasztikus alakváltozás nagysága az első zónában $\gamma_1^p = b$, így ebből a feltételből kiindulva az alakítási keményedés görbéjéből (10. ábra) meghatározzuk a γ_1 teljes deformációt és ennek segítségével az ehhez szükséges τ_1 feszültséget:

$$\gamma_1^p = b = \left(1 - \frac{F}{\mu}\right)(\gamma_1 - \gamma_e), \quad (30)$$

$$\tau_1 = \mu\gamma_e + F(\gamma_1 - \gamma_e). \quad (31)$$

A τ_1 feszültség ismeretében a (27) kifejezésből megkapjuk a diszlokáció fal sebességét:

$$v = \sqrt{\frac{F}{\rho}}, \quad (32)$$

amely megegyezik az előző fejezetben ismertetett módszer segítségével számítható plasztikus hullám terjedési sebességgel. Hasonló módon megkapható a nyújtással kapcsolatos képlékeny alakváltozás hullámainak terjedési sebessége is.

5. ÖSSZEFOGLALÁS

A nagysebességű alakváltozások vizsgálata az anyag alakítási keményedési tulajdonságainak dinamikus vizsgálati módszere. Ez a módszer, a hagyományos, szakitógépekkel végzett vizsgálatokkal ellentétben, a különböző technológiai folyamatokban megvalósuló alakításokhoz közelebb áll. Így az ilyen mérésekből nyert információ hasznosan egészíti ki a hagyományos eredményeket, valamint lehetővé válik a nagysebességgel mozgó diszlokációk tulajdonságainak kísérleti tanulmányozása is.

IRODALOM

1. *H. I. Frost and M. F. Ashby*, Deformation-Mechanism Maps, Pergamon Press, Oxford, 1982.
2. *M. F. Ashby*, Acta Met. 20, 887—897, 1972.
3. *U. Lindholm*, High Velocity Deformation of Solids, eds. *K. Kawata and I. Shiori*, Springer-Verlag, New York, 1978. p. 26.
4. *I. Kovács and L. Zsoldos*, Dislocations and Plastic Deformation, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1973. p. 214.
5. *D. Klahn, A. Mukherjee and I. E. Dorn*, Strain Rate Effects, Second Int. Conf. on Strength of Metals and Alloys, ASM, 1970. p. 951.
6. *A. Seeger*, Phil. Mag. 46, 1194—1217, 1955.
7. *I. Weertman*, Response of Metals to High Velocity Deformation, eds. *P. G. Shewmon and V. F. Zackay*, Interscience Publisher, New York, 1961. p. 205.
8. *I. D. Eshelby*, Proc. Phys. Soc., A62, 131, 1949.
9. *G. Leibfried*, Z. Physik 127, 344, 1950.
10. *I. D. Eshelby*, Proc. Phys. Soc., B69, 1013, 1956.
11. *I. D. Eshelby*, Proc. Roy. Soc., A197, 396, 1949.
12. *M. Wadati, H. Matsumoto and H. Umezawa*, Phys. Rev., D18, 520, 1978, Phys. Lett., 73B, 448, 1978.
13. *I. Weertman*, Response of Metals to High Velocity Deformation, eds. *P. G. Shewmon and V. F. Zackay*, Interscience Publisher, New York, 1961. p. 240.
14. *I. Harding* (ed.), Mechanical Properties at High Rates of Strain, The Institute of Physics, London, 1974.
15. *T. Nicholas*, Experimental Mechanics, 21, 177, 1981.
16. *T. C. T. Ting*, High Velocity Deformation of Solids, eds. *K. Kawata and I. Shiori*, Springer-Verlag, New York, 1978. p. 26.
17. *I. W. Craggs*, Prog. Solid. Mech. 2, 143, 1961.
18. *T. Jimma and T. Masuda*, High Velocity Deformation of Solids, eds. *K. Kawata and I. Shiori*, Springer-Verlag, New York, 1978. p. 289.

10. SZUPERKÉPLÉKENYSÉG

JUHÁSZ ANDRÁS

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOM

1. Bevezetés	521
2. Kísérleti eredmények	522
3. A szuperképlékeny alakváltozás mikromechanizmusai	523
3.1. A különböző deformációs mikromechanizmusok csatolódása	524
3.2. Diffúzió által szabályozott szemcsehatárcsúszás	526
3.3. Kristályszemcséken belüli diszlokációmozgás és a szemcsehatárcsúszás kapcsolata	530
3.3.1. A szemcsehatárdiszlokációk tulajdonságai	531
3.3.2. A szemcsehatárdiszlokációk (szhd) és a rácsdiszlokációk közti kapcsolat	532
3.3.3. A szuperplasztikus deformáció szhd modellje	533
4. Összefoglalás	535

1. BEVEZETÉS

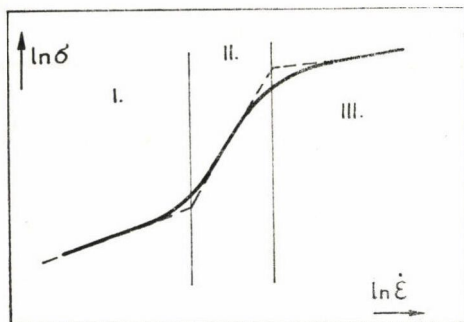
A szokásos szakítóvizsgálatok során a fémek döntő többsége már néhány százalékos megnyúlás után eltörik. *Szuperképlékenységnak* nevezzük egyes ötvözeteknek azt a tulajdonságát, hogy elegendően magas hőmérsékleten és megfelelően kicsi deformációsebesség esetén több száz, esetleg ézerszázalékra is megnyújthatók [1]. (Hasonló nagy megnyúlások tapasztalhatók stacioner kúszás esetén is megfelelő hőmérséklet és feszültség esetén.)

A szuperképlékeny anyagok finomszemcsés szerkezetűek, átlagos szemcseméretük az alakítás hőmérsékletén nem haladhatja meg a $10\text{ }\mu\text{m}$ -t [2]. Az ilyen aprószemcsés anyagok rendszerint eutektikus, illetve eutektoidos összetételűek [2]. A szuperplaszticitáshoz szükséges kis szemcseméretet gyakran finom diszperz eloszlású kiválások biztosítják, amelyek nem gátolják az alakítás során a dinamikus újrakristályosodást (új szemcsék nukleálódását), de akadályozzák a szemcsék növekedését [2–4].

A szuperképlékeny alakváltozás több eltérő, egymással kölcsönhatásban levő deformációs mikromechanizmus együttes eredménye. A szuperképlékenység, gyakorlati alkalmazásai mellett, az elméleti fémfizika számára is különösen érdekes, hiszen módot nyújt a különböző deformációs mikromechanizmusok jobb megismerésére, kapcsolataik tisztázására. Jelen dolgozat a szuperképlékenység legfontosabb kísérleti eredményeinek összefoglalása után a deformáció lehetséges mikromechanizmusait foglalja össze.

2. KÍSÉRLETI EREDMÉNYEK

A magashőmérsékleti szakítóvizsgálatok esetén a deformáló feszültség és az alakítási sebesség kapcsolata jól ábrázolható logaritmikus léptékű grafikonon. Szuperképlékeny tulajdonságokat mutató legkülönbözőbb ötvözetek esetén az $\ln \sigma - \ln \dot{\epsilon}$ grafikon az 1. ábrán bemutatott sematikus görbéhez hasonló. Az elnyújtott „S” görbe elfogadhatóan közelíthető három különböző meredekségű egyenes szakasszal. Ennek megfelelően a feszültség és deformációsebesség függvény három tartományra osztható, amelyek mindegyike jól leírható a



1. ábra. Szuperképlékeny anyagok esetén a feszültség-deformáció sebesség grafikon három tartományra osztható. A II. tartományban jelentkezik a szuperképlékenységi csúcs

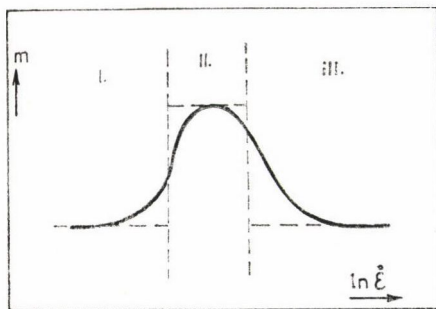
$$\sigma = K \dot{\epsilon}^m \quad (1)$$

hatványfüggvénnyel [5]. A három tartományban K és m értéke különbözik egymástól. K értékét a hőmérséklet és az anyag mikroszerkezeti paraméterei határozzák meg. Az m hatványkitevő értéke 0 és 1 közé esik és erősen függ az alakítás sebességétől.

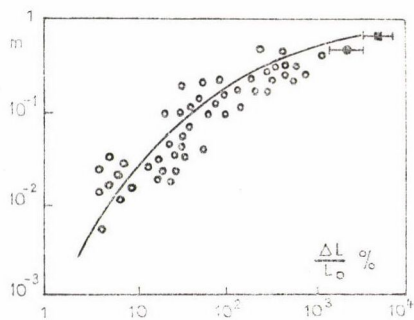
A fémek magashőmérsékleti alakíthatóságának egyik jellemzőjeként m -et használjuk; neve: sebességérzékenységi paraméter, meghatározása kísérleti úton a mért σ és $\dot{\epsilon}$ adatpárok felhasználásával az

$$m = \frac{\partial \ln \sigma}{\partial \ln \dot{\epsilon}} \quad (2)$$

összefüggés alapján történik. A 2. ábra m jellegzetes változását mutatja a deformációsebesség függvényében. A fémek magashőmérsékleti alakíthatósága (maximális megnyúlása) monoton nő m értékének növekedésével. A 3. ábra a legkülönbözőbb fémek meleg szakításakor észlelt maximális relatív megnyúlás és m kapcsolatát mutatja [5].



2. ábra. Az m sebességérzékenységi paraméter változása a deformációsebesség függvényében



3. ábra. Az m sebességérzékenységi paraméter és a minták maximális relatív megnyúlása közti kapcsolat különböző ötvözetek esetén [6]

A grafikonról leolvasható, hogy $\varepsilon \approx 100\%$ deformáció esetén $m \approx 0,3$. A gyakorlatban ezért a szuperplasztikus viselkedés kritériumaként az $m \approx 0,3$ reláció teljesülését tekintik [5, 6]. Különösen indokoltá teszi ezt a megközelítést az a kísérleti tapasztalat, amely szerint az elérhető maximális megnyúlást a próbatestek geometriája, a mintakészítés geometriai hibái lényegesen lecsökkenthetik [7].

A szuperképlékeny alakváltozás ($m > 0,3$) az 1. ábrán bemutatott „S” görbe legmeredekebb középső szakaszára jellemző. Az ötvözetek döntő többségénél ez a tartomány a $10^{-4} - 10^{-6}$ (perc deformációsebesség értékek közé esik. (Érdemes megjegyezni, hogy a hőmérséklet emelésével az „S” görbe a nagyobb sebességek irányába eltolódik. Hasonló hatással van az átlagos szemcseméret csökkenése is [5].) Bár az ötvözetek legnagyobb alakíthatósága a II. tartományban van, a szuperképlékenységi jelenségekörének megértéséhez szükséges, hogy a megelőző és az utána következő sebességtartomány sajátosságait is vizsgáljuk.

A szuperképlékeny deformáció jellegzetesen termikusan aktivált folyamat. A mechanikai paraméterek ún. „termikus analízise”, az ilyen módon meghatározható *aktiválási energia*, illetve *aktiválási térfogat* értékek döntő segítséget adnak a folyamat mikromechanizmusának felderítéséhez [8, 9]. A szuperplasztikus alakváltozás során az aktiválási energia a szemcsehatárdiffúzió aktiválási energiájával egyezik meg, az aktiválási térfogat 10^{-21} cm^3 nagyságrendű [9, 10]. A szuperplasztikus tartományt megelőzően, illetve azt követően a deformációs folyamat aktiválási energiája a szemcsehatárdiffúziós energiánál nagyobb és az öndiffúzió, vagy a diszlokációüregmenti diffúzió aktiválási energiájához áll közel. Az aktiválási térfogat értéke az alakváltozás I. és III. szakaszában kisebb a szuperplasztikus tartományra jellemző értéknél [9, 10].

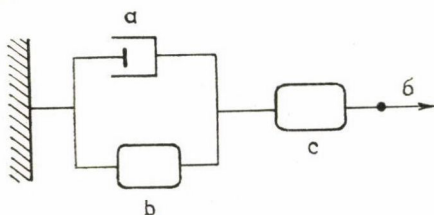
A szuperképlékenység kutatásában a mechanikai mérések fontos kiegészítői a metallográfiai vizsgálatok és az elektronmikroszkópos megfigyelések. Ezek szerint az 1. ábrán bemutatott „S” görbe I. tartományában az alakváltozást döntően az egyes szemcséknek a feszültség irányába történő megnyúlása (ami Herring—Nabarro, illetve Coble mechanizmusra utal), kb. 20%-ban pedig a szemcsehatárcsúszás eredményezi, a szemcsék belsejének diszlokációmozgással kapcsolatos deformációja gyakorlatilag elhanyagolható [11]. A szuperplasztikus viselkedés tartományában az alakváltozás 80%-a szemcsehatár csúszás eredménye. Az egyes szemcséken belül megfigyelhető csúszásvonalak, illetve a szemcsék alakjának elnyúlása, a gyakran megfigyelhető szemcsenövekedés arra utal, hogy a szemcsehatárcsúszás mellett a szemcséken belüli diszlokációmozgás is jelentős, valamint a diffúzió sem elhanyagolható a deformáció szempontjából [11]. A III. sebességtartományban a szemcsehatárcsúszás szerepe csökken (kb. 20%), míg a szemcséken belüli deformáció jelentősége nő [11].

3. A SZUPERKÉPLÉKENY ALAKVÁLTOZÁS MIKROMECHANIZMUSAI

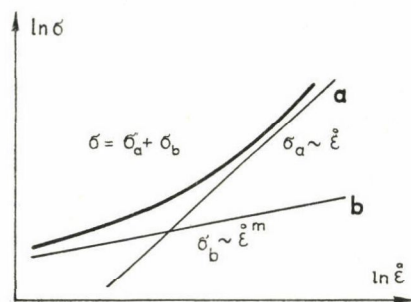
A szuperképlékenység több különböző deformációs mikromechanizmus egyidejű működésének feltételezésével érthető meg. Az 1. ábrán bemutatott „S” görbe értelmezéséhez legalább három, egymással sajátos kapcsolatban levő mikromechanizmust kell feltételeznünk. A különböző deformációs mechanizmusok közül a különböző alakítási sebességek esetén egyik vagy másik dominánsá válik, míg a többi alárendelt, de így is nélkülözhetetlen.

3.1. A különböző deformációs mikromechanizmusok csatolódása

A különböző deformációs mechanizmusok sajátos kapcsolatát, *H. P. Stüwe* nyomán, a reológiaiában szokásos modell kapcsolásokhoz hasonló módon szemléltethetjük [12]. A modell kapcsolásban a szemcsehatárcsúszást egy ideálisan viszkózus test (Newton test) szimbolizálja, a deformáció diszlokációmozgással kapcsolatos mikromechanizmusait hatványfüggvénnyel jellemezhető kapcsolási elemek helyettesítik. A szuperplasztikus fémek esetén kísérletileg tapasztalt feszültség-deformációsebesség kapcsolatnak a 4. ábrán bemutatott modell felel meg. A modell párhuzamosan kötött **a** és **b** eleme a szemcsehatárcsúszást és az ezzel párhuzamosan működő, az anyag folytonosságát biztosító másodlagos deformációs mechanizmust jelöli. A szemcsehatárcsúszás nem lehet független, önálló deformációs mechanizmus. Ha ugyanis csak ez működne, akkor az egymás mellett elcsúszó, változatlan alakú szemcsék között üregek, repedések képződnének, amelyek nagyon rövid idő alatt a minta törését eredményeznék. Az anyag folytonosságát tehát járulékos deformációs mechanizmusoknak kell biztosítani. Ez a folyamat a szuperplasztikus alakváltozás során a próbatest megnyúlásához alig járul hozzá, de a szemcsék alakjának folyamatos változtatásával megakadályozza üregek, repedések kialakulását.



4. ábra. A szuperképlékeny anyag „reológiai” kapcsolási modellje



5. ábra. Párhuzamosan működő szemcsehatárcsúszás és szemcsén belüli diszlokációmozgás eredő $\ln \sigma - \ln \dot{\epsilon}$ görbéje

A σ deformáló feszültség a modell párhuzamosan kapcsolt **a** és **b** ágában úgy oszlik meg, hogy mindkét elem azonos $\dot{\epsilon}_1$ deformációsebességgel nyúljon, azaz

$$\sigma = \sigma_a + \sigma_b, \quad (3)$$

ahol $\sigma_a = A\dot{\epsilon}_1 \cdot \sigma_b$ -re vonatkozóan a következő mondható. A szuperplasztikus alakváltozást értelmező elméletek két csoportba sorolhatók aszerint, hogy a szemcsehatárcsúszás mint elsődleges folyamat mellett a diffúziós anyagáramlást, vagy a szemcséken belüli diszlokációmozgást tekintik az anyag folytonosságát biztosító másodlagos mechanizmusnak. E szerint a (3) összefüggésben

$$\sigma_b = B\dot{\epsilon}_1$$

(ahol B állandó), ha az anyag folytonosságát diffúzió biztosítja, illetve

$$\sigma_b \sim \dot{\epsilon}_1^m$$

(ahol $0 < m < 1$) ha a másodlagos folyamat a szemcséken belüli diszlokációmozgás.

A párhuzamosan működő két mikromechanizmus esetén az eredő $\ln \sigma - \ln \dot{\epsilon}$ grafikont az 5. ábra mutatja.

A 4. ábrán a c kapcsolási elem a külső feszültség hatására a szemcséken belüli, a szemcsehatárcsúszástól gyakorlatilag független deformációt jelképezi. Ez utóbbi mechanizmus a magashőmérsékleti kúszásra elterjedten használt *Weertman*-modellnek [9, 10] megfelelően a

$$\sigma \sim \dot{\epsilon}_2^m$$

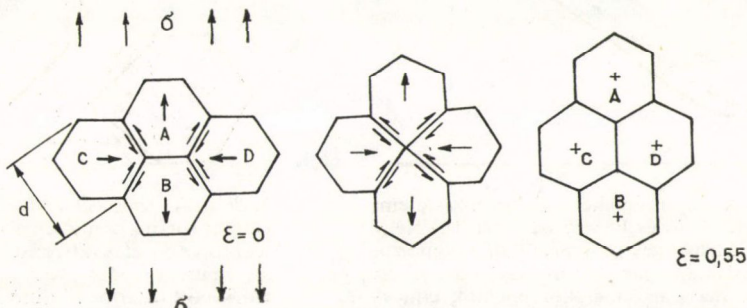
hatványfüggvénnyel jellemezhető, ahol $m \approx 0,33$.

A 4. ábrán bemutatott modell σ terhelése esetén a sorbakötött elemek deformációsebessége összegződik, az eredő deformációsebesség így

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_1 + \dot{\epsilon}_2.$$

A modellkapcsolás mindhárom elemét figyelembe véve megkapható a szuperplasztikus anyagokon kísérletileg adódó $\ln \sigma - \ln \dot{\epsilon}$ összefüggéshez hasonló „S” görbe (6. ábra). Megjegyezzük, hogy a grafikonon a c kapcsolási elemre jellemző egyenes a b elem egyeneséhez közel párhuzamos, de jóval fölötte fut. Ez annak a következménye, hogy a b mechanizmus már jóval kisebb külső feszültségek esetén is működik, hiszen itt a szemcsehatárcsúszás révén a szemcseélek mentén fellépő belső feszültségek is segítik a diszlokációk mozgását, illetve a diszlokációforrások működését.

A 6. ábra grafikonja, valamint a 4. ábrán bemutatott kapcsolási modell segítségével megállapítható, hogy az I., illetve III. sebességtartományban a deformáció meghatározó folyamata a diszlokációmozgás, míg a II. szuperképlékenység tartományára a szemcsehatárcsúszás a jellemző. A továbbiakban a szuperplasztikus alakváltozási szakaszra jellemző szemcsehatárcsúszás mechanizmusát és a hozzá kapcsolódó, az anyag folytonosságát biztosító másodlagos deformációs folyamatot vizsgáljuk részletesebben.

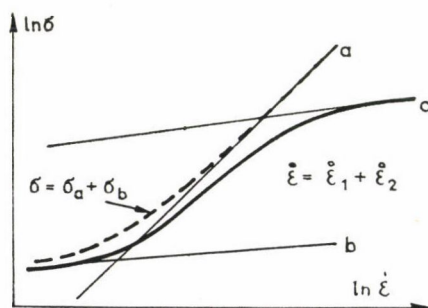


6. ábra. A szuperplasztikus anyagokra jellemző $\ln \sigma - \ln \dot{\epsilon}$ grafikon származtatása a 4. ábrán bemutatott modell alapján

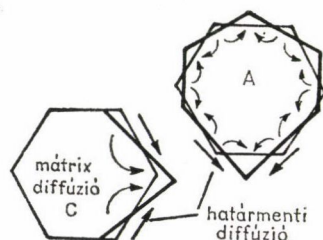
3.2. Diffúzió által szabályozott szemcsehatárcsúszás

A superképlékeny deformációt diffúzió által szabályozott szemcsehatárcsúszással értelmező elméletek közül a legismertebb *Ashby* és *Verrall*-modellje [15]. A modell nagyfeszültségű elektronmikroszkóppal végzett „in situ” megfigyeléseken, illetve olajemulzióval végzett kétdimenziós modellkísérleteken alapul. Az elektronmikroszkópos vizsgálatok és a modellkísérletek egybehangzóan azt mutatják, hogy a szemcsehatárcsúszás eredményeként a közvetlenül érintkező szemcsék átrendeződnek, miközben a közvetlen szomszédok cserélődnek.

A szemcsék átrendeződése nélkül megy végbe, hogy az egyes szemcsék alakja lényegesen megváltozna. Hatszöges szemcsékből álló idealizált szerkezetet feltételezve, a mechanizmust a 7. ábrán érzékeltetjük. Tekintsük kiindulásként a hatszöges szerkezet 7a. ábrán bemutatott négy szemcséjét. A négy szemcséből álló csoport a függőleges irányú húzófeszültség hatására deformálódik. A szemcsehatárcsúszás irányait a határok mellé lerajzolt nyilak jelzik. A folyamatos szemcsehatárcsúszás együtt jár a szemcsék alakjának átmeneti megváltozásával. A két folyamat eredményeként az *A* és *B* szemcsék tömegközéppontja távolodott egymástól, míg a *C* és *D* szemcsék középpontja közeledett egymáshoz. A 7b. ábrán bemutatott átmeneti állapoton keresztül a szerkezet a 7c. ábrának megfelelően újból stabilá válik. A végállapot és a kiindulási állapot termodinamikai szempontból egyenértékű. A szemcse átrendeződés révén $\varepsilon = 0,55\%$ -os megnyúlás következett be a feszültség irányában. A kezdetben közvetlen szomszédos *A* és *B* szemcsék eltávolodtak egymástól, míg a *C* és *D* szemcsék közvetlen szomszédokká váltak. *Ashby* és *Verrall* a négy szemcséből álló csoport átrendeződését tekinti a superplasztikus alakváltozás elemi lépésének. Természetesen a szemcseátrendeződés több részfolyamat együttes eredménye. A részfolyamatok közül a szemcsehatárcsúszás mellett a diffúzió a legjelentősebb. A deformáció során a szemcsék alakjának folyamatos változását diffúziós anyagátrendeződés biztosítja. A 8. ábra az *A* és *C* szemcsék alakjának megváltozását és az azt biztosító diffúziós áramokat mutatja be.



7. ábra. A superképlékeny alakváltozás elemi folyamata *Ashby* és *Verrall* szerint [15] a) Négy idealizált hatszöges szemcséből álló csoport a kiindulási állapotban. A szemcsehatárcsúszás irányait, illetve a szemcsék középpontok elmozdulásának irányát nyilak jelzik. b) Átmeneti állapot, instabil négyes határtalálkozással. c) Végállapot ($\varepsilon = 0,55\%$), egyensúlyi szerkezet



8. ábra. A szemcseátrendeződési folyamat során a szemcsék alakja változik. Az alakváltozást okozó anyagátrendeződés térfogati-diffúzió, illetve határmenti diffúzió révén valósul meg

A szemcsehatárcsúszást, a diffúziót, valamint a szemcseátrendeződés átmeneti szakaszában fellépő határfelületnövekedést (határfelületi energia növekedést) figyelembe véve a modell segítségével megadható a különböző fémek szuperképlékeny deformációjára jellemző

$$\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}(\sigma, T)$$

anyagtörvény (konstitutív egyenlet).

Az $\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}(\sigma, T)$ összefüggés levezetésénél termodinamikai megfontolásokból indulhatunk ki. Mivel a 7. ábrán a szemcsék kiindulási és végállapota egyenértékű, a szemcseátrendeződés során a négy szemcséből álló csoport belső energiája nem változhat meg. A deformáció során végzett mechanikai munka tehát a részfolyamatok során disszipálódik, azaz irreverzibilis entrópia termelődésre fordítódik, így

$$\sigma \Delta \varepsilon_0 V = T \Delta S_{\text{irrev.}}, \quad (1)$$

ahol σ a külső feszültség, $\Delta \varepsilon_0$ a négy szemcse átrendeződése során bekövetkező deformáció, V a négy szemcse össztérfogata. Az egyenlet jobb oldala az állandó hőmérsékleten disszipálódott energia, itt T az abszolút hőmérséklet, $\Delta S_{\text{irrev.}}$ a folyamat irreverzibilitása miatt fellépő entrópiánövekmény. Az (1) egyenlet mindkét oldalát elosztva a 7. ábrán bemutatott elemi szemcseátrendeződési folyamat Δt idejével, kapjuk, hogy

$$\sigma \dot{\varepsilon} V = T \left(\frac{\Delta S}{\Delta t} \right) = T \Theta V, \quad (2)$$

ahol $\dot{\varepsilon} = \frac{\Delta \varepsilon_0}{\Delta t}$ a deformáció sebessége, Θ az irreverzibilis részfolyamatok egységnyi térfogatra vonatkoztatott entrópiatermelésének sebessége.

Ashby és Verrall a T hőmérsékleten bekövetkező szemcseátrendeződés entrópia-termelő irreverzibilis részfolyamataira, — a szemcsehatárcsúszásra, a szemcsehatárfelületi energia ingadozására és a diffúzióra —, külön-külön meghatározta az energia disszipáció sebességét, azaz a $T\Theta V$ szorzat értékét. A makroszkopikus deformációsebesség az összes részfolyamatokban disszipált energiák összegével hozható kapcsolatba:

$$\sigma \dot{\varepsilon} V = V \sum_i T \Theta_i. \quad (3)$$

3.2.1. A szemcsehatárcsúszás során disszipálódó energia

A legegyszerűbb szemcsehatármodellek szerint a szemcsehatárok atomi szerkezete a folyadékok szerkezetéhez hasonló [16]. Ebből kiindulva a szemcsehatárcsúszás egyszerűen úgy képzelhető el, mintha a szomszédos szemcsék egy vékony viszkózus folyadékfilmen csúsznának el egymáshoz képest. A szemcsehatárcsúszás a newtoni viszkózitási törvénnyel írható le

$$\tau = \eta \frac{\Delta u}{\delta}, \quad (4)$$

ahol τ a határmenti nyírófeszültség, Δu a két szomszédos szemcse elcsúszásának nagysága, $\frac{\Delta u}{\Delta t}$ a csúszás átlagsebessége, δ a határréteg vastagsága.

A szemcsehatárcsúszás során az entrópia termelés sebessége

$$(VT\Theta)_{\text{szhcs}} = \frac{dW}{dt}, \quad (5)$$

ahol dW , a belső súrlódási munka kifejezhető a τ feszültséggel és a szemcsehatárfelülettel (A)

$$dW = \tau A \Delta u. \quad (6)$$

Figyelembe véve, hogy az elcsúszási távolság a szemcsemérettel (d), illetve a szemcsehatárfelület d^2 -tel arányos, valamint, hogy $\Delta t = \frac{\Delta \varepsilon_0}{\dot{\varepsilon}}$ az entrópiatermelődés sebességére a

$$(VT\Theta)_{\text{szhcs}} = C_1 \frac{d^3 \eta}{\delta} \left(\frac{\dot{\varepsilon}}{\varepsilon_0} \right)^2 \quad (7)$$

kifejezés adódik. A belsősúrlódási együttható az ún. Stokes—Einstein összefüggés segítségével fejezhető ki:

$$\eta_B = \frac{kT}{4D_h} \Omega^{-1/3},$$

ahol D_h a szemcsehatármenti diffúziós együttható, Ω egy atom térfogata.

3.2.2. Szemcsehatárok összfelületének ingadozásából származó entrópianövekmény

A 7. ábrán bemutatott szemcsecsoport kezdeti és végállapota energetikailag egyenértékű, a szemcsehatárok összfelülete is azonos. Ehhez a felülethez képest az átrendeződés közben átmenetileg ΔA -val megnő a szemcsehatárfelület ($\Delta A = c_2 d^2$). Figyelembe véve a szemcsehatárok γ felületi feszültségét, az átmeneti felületnövekedés $\gamma \Delta A$ energianövekedéssel jár. Ez az energia növekmény a szemcseátrendeződési folyamat második szakaszában hővé disszipálódik. Az entrópianövekedés sebessége a folyamat során

$$(VT\Theta)_{\text{felület}} = \frac{\Delta A \gamma}{\Delta t} = \frac{c_2 d^2 \gamma \dot{\varepsilon}}{\varepsilon_0}. \quad (8)$$

3.2.3. A diffúzió során disszipálódó energia

A deformálódó minta anyagának folytonosságát *Ashby* és *Verrall* modellje szerint diffúziós anyagtranszport biztosítja. A diffúzió révén a szemcsék alakja úgy változik meg, hogy a szemcsehatárcsúszás ne eredményezze szemcséközi üregek kialakulását. A diffúzió hajtóereje a kémiai potenciál változása a szemcsén belül. A diffúziós

folyamat során egységnyi idő alatt disszipált energiát a diffúzióban résztvevő atomok együttes száma és a $\Delta\mu$ átlagos kémiai potenciálkülönbség szorzata adja meg, azaz:

$$(VT\Theta)_{\text{diff.}} = I\Delta\mu, \quad (9)$$

ahol I a diffúziós anyagáram. Ha feltételezzük, hogy a négy szemcse mindegyikében ΔN atom mozog, akkor a szemcseátrendeződés Δt időtartamához rendelhető átlagos anyagáram:

$$I = \frac{4\Delta N}{\Delta t}. \quad (10)$$

Mivel a mozgó atomok száma arányosnak tekinthető a szemcsékben levő összes atomok számával, ezért ΔN az átlagos szemcsemérettel (d) és az atomtérfogattal (Ω) kifejezhető:

$$\Delta N = c_3 \frac{d^3}{\Omega}. \quad (11)$$

A (10) és (11) kifejezéseket (9)-be behelyettesítve és felhasználva, hogy $\Delta t = \frac{\varepsilon_0}{\dot{\varepsilon}}$, a diffúziós folyamatok entrópiatermelési sebességére a

$$(VT\Theta)_{\text{diff.}} = 4c_3 \frac{d^3 \dot{\varepsilon}}{\Omega \varepsilon_0} \Delta\mu \quad (12)$$

összefüggés adódik.

A formulában szereplő $\Delta\mu$ kémiai potenciál különbséget az Einstein-féle diffúziós egyenlet segítségével kifejezhetjük a D_h határmenti, illetve a D_m mátrix diffúziós együtthatókkal és az átlagos szemcsemérettel arányos átlagos diffúziós távolságokkal.

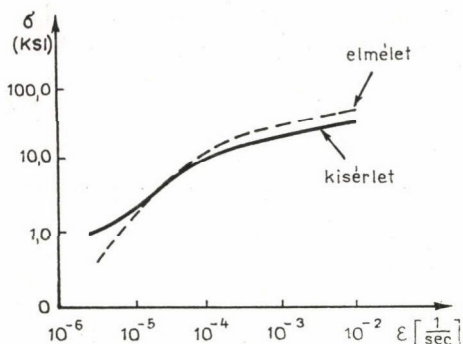
A diffúziós folyamatok által meghatározott sebességű szuperképlékeny deformációra jellemző $\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}(T, \sigma)$ anyagtörvény a (7), (8), illetve (12) összefüggéseket felhasználva (3) alapján írható fel:

$$\dot{\varepsilon} = 100 \frac{\Omega}{kTd^2} \left\{ \sigma - \frac{0,72\gamma}{d} \right\} D_m \left(1 + \frac{3,3\delta}{d} \frac{D_h}{D_m} \right). \quad (13)$$

A (13) egyenletben szereplő számértékek a (7), (8), (11) összefüggésekben szereplő c_1 , c_2 , c_3 arányossági tényezőknek a hatszöges modellszemcsékre vonatkoztatott értékei.

Ashby és Verrall-modellje kétdimenziós idealizált szemcsecsoport sajátos átrendeződését tekinti a szuperplasztikus deformáció jellemző folyamatának. A kétdimenziós modellt Gifkins [17], illetve Langdon [5] fejlesztette tovább, figyelembe véve, hogy a szemcsehatárcsúszás révén a szemcsék kimozdulhatnak eredeti síkjukból. Az egymástól ilyen módon eltávolodó, eredetileg szomszédos szemcsék közé a minta belsejéből a felszínre csúszó újabb szemcsék ékelődhetnek be. Gifkins és Langdon változtatása a konstitutív egyenlet levezetésében nem okoz lényeges változást, így a (13) összefüggés továbbra is érvényesnek tekinthető.

A szuperplasztikus ötvözetekre vonatkozó kísérleti tapasztalatokkal a modellből számolt eredmények jól összeegyeztethetők, ha a diffúziókontrollált szemcsehatár-



9. ábra. A Zn—0,2%—Al superplasztikus ötvözetben mért eredmények [18] (folytonos vonal) jó egyezést mutatnak az Ashby-Verrall- modell alapján számított értékekkel (szaggatott vonal)

és a szemcséken belüli deformáció eredő sebessége adja a minta deformációsebességét. A modell alapján számolt eredmények és a mért adatok illeszkedését a 9. ábra görbéi bizonyítják. A folytonos vonallal kihúzott görbe Cook és Risebrough Zu 0,2% Al ötvözetben mért eredményeit tükrözi [18] ($T=300$ K, átlagos szemcseméret $d=3,5 \mu\text{m}$) a szaggatott vonal a modell alapján számított értékeknek felel meg. A modell számítások során az anyagi paraméterek értékét a tiszta cink adataival helyettesítették.

csúszás mellett feltételezzük egy attól független, az egyes szemcsék belsejében működő diszlokációs mechanizmus működését is. A szemcsén belüli deformáció leírására a Weertman által magas hőmérsékletekre kidolgozott diszlokációs mechanizmust alkalmazhatjuk. A Weertman-modell szerint a deformációsebesség ($\dot{\epsilon}$) és a feszültség (σ) közt a

$$\dot{\epsilon} = \frac{AGb}{kT} \left(\frac{\sigma}{G} \right)^n \exp - \frac{Q}{kT} \quad (14)$$

összefüggés áll fenn, ahol G a nyírási modulus, b a rácdiszlokációk Burgers-vektora, Q a folyamat aktiválási energiája, T a hőmérséklet, A és n empirikusan meghatározott állandók [13]. A szemcsehatárcsúszás

3.3. Kristályszerkezetben belüli diszlokációmozgás és a szemcsehatárcsúszás kapcsolata

A legutóbbi 10—15 évben végzett elektronmikroszkópos megfigyelések alapján feltehető, hogy a szemcsehatárcsúszás a határszerkezet jellegzetes vonalhibái, a szemcsehatárdiszlokációk (szhd-k) mozgásával kapcsolatos. (A kísérleti eredmények döntő többsége ikerhatárokon megfigyelt szhd-k-ra vonatkozik.) Ugyancsak elektronmikroszkópos vizsgálatok bizonyítják, hogy a szhd-k folyamatos mozgása (szemcsehatárcsúszás) mindig kapcsolódik a kristályszerkezetben belüli diszlokációmozgásokhoz [19, 20]. Az elektronmikroszkópos vizsgálatok eredményeit figyelembe vevő elméletek a szemcsehatárcsúszást szhd-k mozgására vezetik vissza, miközben az anyag folyamatosságát biztosító másodlagos mechanizmusként a szemcséken belüli diszlokációmozgást veszik figyelembe. A modell jobb megértéséhez először röviden összefoglaljuk a szhd-k tulajdonságait, majd a szemcsehatárdiszlokációk és a rácdiszlokációk mozgásának csatolásával foglalkozunk.

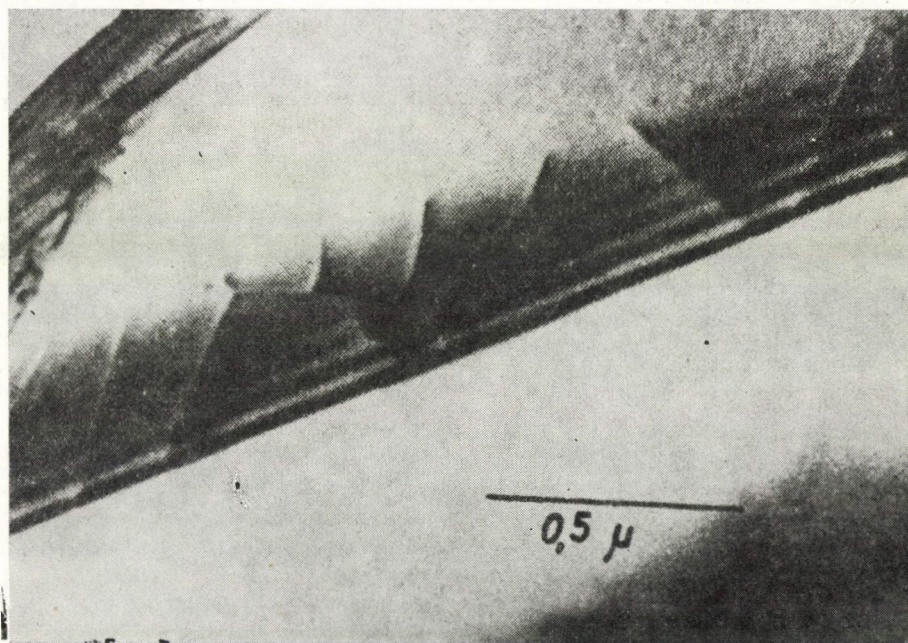
3.3.1. A szemcsehatárdiszlokációk tulajdonságai

A nagyszögű szemcsehatárok atomi szerkezete általában jól leírható egy a két szemcse orientációviszonyától meghatározott szuperrácsal [21]. Mivel a határfelület sohasem teljesen sík, ezért az idealizált szuperrács szükségszerűen sok hibát tartalmaz. A szemcsehatár szerkezetek vonalhibája a szemcsehatárdiszlokáció [19, 20]. A szhd-k tulajdonságait a rácsdiszlokációkkal mutatott hasonlóságuk segítségével foglaljuk össze.

— A szhd-k a rácsdiszlokációkhoz hasonlóan a képlékeny alakváltozás során kapnak aktív szerepet. A szhd-k csúszómozgása eredményezi a szemcsehatárcsúszást (a szhd-k kúszó mozgást is végeznek, ilyen esetben a határ a felületére merőlegesen elmozdul, amivel szemcsehatárlépcső képződik).

— A szhd-k jellemzésére a rácsdiszlokációkhoz hasonlóan a **b** Burgers-vektort használjuk. A szhd-k Burgers-vektora a határszerkezet periódustávolsága, rendszerint a kristály rácsállandójának többszöröse. A szhd Burgers-vektora és a szhd vonala egyaránt a szemcsehatár felületében fekszik. A szhd a rácsdiszlokációkhoz hasonlóan lehet él vagy csavar jellegű. A szemcsehatárok szerkezete a két szomszédos szemcse orientációkülönbségétől függ. Mivel egy-egy szemcse rendszerint több másik szemcsével határos, ezért a határszerkezet is ennek megfelelően változik. Egy adott Burgers-vektorú szhd csak addig mozoghat „szabadon” a határban, míg annak szerkezete, rendszerint egy törésvonal után, meg nem változik.

— A szhd-nek feszültségtére és sajátenergiája van. A szhd sajátfeszültség-terén keresztül kölcsönhat minden olyan objektummal, amely a határszerkezetben feszült-



10. ábra. Szemcsehatárdiszlokációk elektronmikroszkópi képe ikerhatárban [20]

ségeket ébreszt (kiválások, más szemcsehatárdiszlokációk, határnál a szemcsében feltorlódott rácsdiszlokációk stb.).

— A szhd elektronmikroszkópos kontrasztja a rácsdiszlokációéhoz hasonló, azzal analóg módon értelmezhető. A 10. ábrán bemutatott elektronmikroszkópi felvételen jól megfigyelhetők egyenes ikerhatár extinkciós kontrasztjára közel merőlegesen ráakódó szhd kontrasztvonalak.

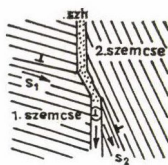
— A szemcsehatárdiszlokációk a deformációs folyamat során megsokszorozódhatnak. A diszlokációsokszorozást a rácsdiszlokációkhoz hasonlóan Frank—Read források aktiválódása biztosítja.

3.3.2. A szhd és a rácsdiszlokációk közti kapcsolat

Az elektronmikroszkópos vizsgálatok segítségével beigazolódott a szemcsehatárcsúszás és a szemcsén belüli deformáció, illetve a szhd és a rácsdiszlokáció sajátos kapcsolata [20, 22]. A polikristályos fémek folyamatos alakításakor rendszerint mindkét mechanizmus működik. Az alakítás körülményeitől, a deformációsebességtől, és a hőmérséklettől, az anyag szemcseméretétől és összetételétől, kiválások szerkezetének jellegétől függ, hogy mikor melyik deformációs mechanizmus válik elsődlegessé, illetve melyik szorul háttérbe.

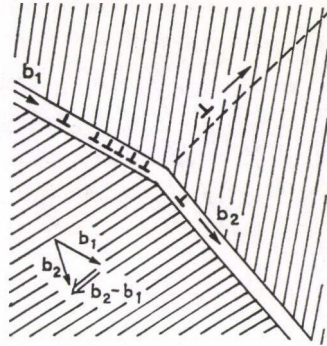
Tekintsünk először egy olyan esetet, amikor a szemcséken belüli diszlokációmozgás a meghatározó mikromechanizmus. A deformáló feszültség hatására a szemcsék belsejében mozgó diszlokációk a szemcsehatárt elérve megakadnak. Ha az így feltorlódó diszlokációsor feszültségtére elegendően nagyvá válik, a csúszás a szomszédos szemcsében is megindul. A szemcsehatár diszlokációkat „nyel el” a feltorlódott diszlokációsorból, miközben a szomszédos szemcse felé diszlokációkat bocsát ki. A szemcsék közti orientációeltérés miatt a diszlokációk csúszási rendszere a két szemcsében különböző, ezért ilyenkor a szemcsehatár általában ferdén elnyíródik (11. ábra). A határon keletkezett „ferde” lépcső a határszerkezetben erős deformációt és így nagy belső feszültségeket okoz. Az elektronmikroszkópos megfigyelések szerint gyakori, hogy a lépcső feszültségtére a határban szhd-kat termelő Frank—Read forrásokat aktivál. Az így keltett szhd-k a határban elcsúszva csökkentik a lépcső feszültségtérét, így a két szomszédos szemcse csatolt deformációja folyamatos lehet. (Amennyiben a határban nincsenek aktiválható szhd források, úgy a lépcső feszültségtére megállítja a szemcséken belüli folyamatos diszlokációmozgást.)

Magas hőmérsékleteken, és alacsony alakítási sebességek esetén a finomszemcsés anyagokban a szemcsehatárcsúszás az elsődleges deformációs folyamat. Szuperképlékeny alakítás esetén a deformáció 80%-a a szemcsehatárcsúszás eredménye. A szemcsehatárcsúszás során a határban folyamatosan szhd-k termelődnek és mozognak. A szhd-k azonban csak sík határfelület esetén mozoghatnak könnyen. Ha például



11. ábra. Szomszédos szemcsék folyamatos deformációja során a diszlokációk „átléphetnek” a két kristallit határán, miközben a határon egy ferde lépcső képződik. A lépcső kialakulása során keletkezett belső feszültség szhd-kat kelt, amelyek a határban elcsúszva csökkentik a lépcső feszültségtérét

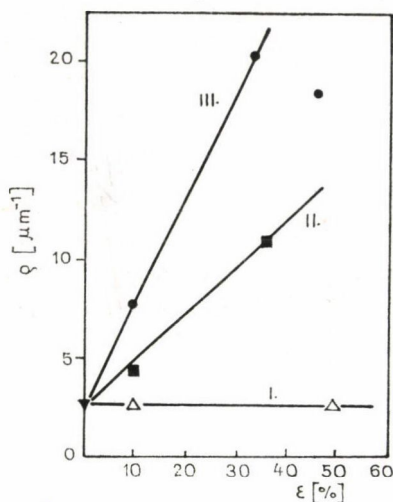
a sík szemcsehatár-felület valami miatt könnyökszerűen megtörik a szhd nem csúszhat tovább. A szhd ugyanis csak a diszlokációvonal és a \mathbf{b} Burgers-vektora által meghatározott síkban csúszhat el, és a könyöknél a \mathbf{b} Burgers-vektornak a határfelületet követve irányt kellene változtatnia; a mozgó szhd-k ezért a törésvonalban megakadnak és feltorlódnak. Hasonló szhd torlódások keletkeznek a hármas szemcsehatártalálkozás vonalak mentén is. Ez utóbbi esetben a határszerkezet változása miatt a \mathbf{b} Burgers-vektornak nem csak az iránya, hanem nagysága is meg kellene változzon. Az egymásra torlódott diszlokációk feszültségtére végül is akkora lehet, hogy a torlódás első diszlokációját „átnyomja” a könyökn. Ilyenkor szhd reakció játszódik le, melynek során a b_1 Burgers-vektorú szhd-ból b_2 Burgers-vektorú szhd keletkezik. A diszlokáció-reakció egyenlet értelmében azonban a könyöknél visszamarad a határban egy $(b_2 - b_1)$ Burgers-vektorú ún. „misfit” diszlokáció. Minden egyes szhd átjutása a könyökn újabb és újabb „misfit” diszlokációt hagy hátra. A visszamaradó „misfit” diszlokációk feszültségtére a könyöknél olyan nagy feszültségeket eredményezhet, hogy az meghaladja a kristály szilárdságát. Ilyenkor a szemcsehatár könyök a határ mentén fekvő szemcsék felé mint diszlokációforrás működhet. Ez a forrás olyan b Burgers-vektorú rácdiszlokációkat termel, melyek a „misfit” diszlokációk hatását csökkentik, esetleg egészen megszüntetik, és így a szemcsehatárcsúszás tovább folytatódhat. (12. ábra.)



12. ábra. A szhd csúszásakor a szemcsehatárfelület élei, csúcsai, rácdiszlokációk forrásaiként működnek

3.3.3. A superplasztikus deformáció szhd-os modellje

A kísérleti tapasztalatok szerint a superplasztikus deformáció mintegy 80%-ban szemcsehatárcsúszás eredménye, míg a fennmaradó hányad a szemcséken belüli diszlokációmozgás következménye. Howell és Dunlop superplasztikus ötvözetek mindhárom sebességtartományában elektronmikroszkóppal vizsgálta a szemcsehatárdiszlokációk szerepét [23]. A 13. ábra egyenes ikerhatárokból mért átlagos szhd sűrűség változását tünteti fel az alakváltozás %-os mértékének függvényében. A grafikonról leolvasható, hogy míg az I. sebességtartományban a szhd száma gyakorlatilag változatlan, addig a II. és III. tartományban a szhd sűrűség a deformáció mértékével arányosan nő. Az elektronmikroszkópos megfigyelések szerint a superplasztikus alakváltozás során a szemcsehatárok élei mentén, vagy a határban levő kiválások előtt feltorlódó szhd-k hasonló szerkezetű diszlokációhálókat képeznek, mint deformált mátrixban a rácdiszlokációk. A 14. ábra egyenes ikerhatárban kialakult szhd hálót mutat. A szhd és a rácdiszlokációk közti hasonlóság alapján feltételezhető, hogy a folyamatos szemcsehatárcsúszás szabályozó mechanizmusa a szhd-k kúszása (climb), amelyek révén azok kiszabadulhatnak a rögzítő hálószerkezetből. Howell és Dunlop elmélete szerint a szhd-k kúszása lényegesen lassúbb folyamat mint szemcséken belüli diszlokációmozgás, ezért ez a részfolyamat tekinthető a superplasztikus alakváltozás sebességét meghatározó mechanizmusnak [23]. A szhd kúszásnak leírása,

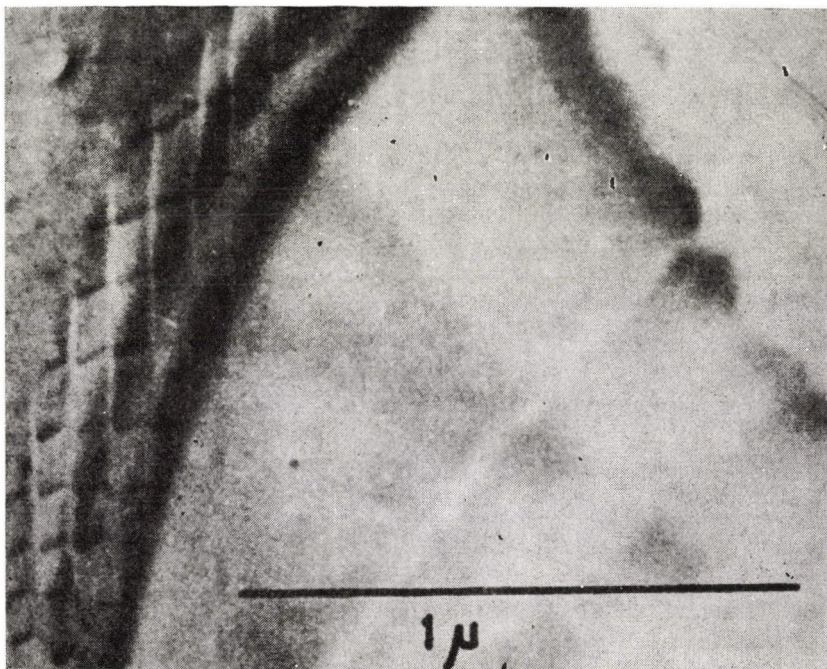


13. ábra. Szhd sűrűség változása a deformáció függvényében három különböző deformációsebesség-tartományban [23]

a rácdiszlokációkra Ball és Hutchinson által kidolgozott kúszásmodell [24] analógiájára történhet. Így a szemcsehatárcsúzás sebessége a

$$\dot{\epsilon} = \frac{AGb}{kT} \left(\frac{b}{d}\right)^2 \left(\frac{\sigma - \sigma_0}{G}\right)^n D_h \quad (14)$$

kifejezéssel közelíthető, ahol A állandó, G a nyírási modulusz, b a mozgó szemcsehatárdiszlokációk Burgers-vektora, d az átlagos szemcseméret, σ a deformáló feszültség, σ_0 a diszlokációk mozgatásához szükséges küszöbfeszültség, D_h a szemcsehatárdiffúziós együttható. Az n értéke Ball és Hutchinson szerint rácdiszlokációk esetén 2, de a kísérleti eredményekkel mutatott jó egyezés szerint szhd esetén sem tér el lényegesen ettől ($n \approx 2$). A diszperz kiválásokat tartalmazó ötvözetekben a szhd-k mozgását elsősorban a határban levő idegen fázisú részecskék gátolják. Ez utóbbi esetben a (14) formulában a d átlagos szemcseméret helyett, értelemszerűen, a kiválások átlagos távolságát kell figyelembe venni.



14. ábra. Ikerhatárban kialakult szhd háló elektronmikroszkópi felvétele [20]

4. ÖSSZEFOGLALÁS

A szuperplasztikus alakítás elméleti érdekessége mellett elsősorban az ipari szakemberek számára ígér sokat. Ez az oka, hogy egyre újabb szuperképlékeny ötvözeteket dolgoznak ki és azokat egyre sokoldalúbban vizsgálják. A jelen dolgozatban ismertetett modellek a jelenségeket leegyszerűsítve, a legjellemzőbb effektusokra összpontosítva értelmezik.

Nem veszik például figyelembe a szuperképlékeny alakítás során rendszerint megfigyelhető szemcsedurvulást [3, 25, 26], vagy a hármas határtalálkozási pontokban tapasztalható üregképződést, ezek növekedését [25]. Nem tisztázzák a fenti elméletek a dinamikus újrakristályosodás szerepét sem. Mérések bizonyítják, hogy 150—500 %-os megnyúlások egyes nagyszemcsés ($d \approx 300 \mu\text{m}$) ötvözeteken is megfigyelhetők [27]. Így még az sem állítható kizárólagosan, hogy a szuperképlékenység a finomszemcsés szerkezet tulajdonsága és a legjellemzőbb deformációs mikromechanizmusa a szemcsehatárcsúszás. Ezt figyelembe véve érthető, hogy a modellek erősen korlátozott érvényűek, egyes anyagok esetén a kísérleti tapasztalatokkal jó egyezést mutatnak, míg más esetekben ellentmondásra vezetnek.

A rohamosan növekvő empirikus ismeretanyag birtokában egyre inkább csak azt mondhatjuk, hogy a „szuperképlékeny alakváltozás” megjelölés gyűjtőfogalom, amely csupán az anyag speciális körülmények közt tapasztalható nagyfokú alakíthatóságára utal, de korántsem jelenti azt, hogy ezen anyagok viselkedését egységesen, egyetlen jellemző deformációs mechanizmussal értelmezni lehet.

IRODALOM

1. Turmezei T., Magyar Alumínium, 18, 351, 1981.
2. J. W. Edington, Metals Technology, 17, 138, 1976.
3. R. Grimes, M. J. Stowell, B. M. Watts, Metals Technology, 17, 154, 1976.
4. J. A. Belk, Metals Technology, 17, 161, 1976.
5. T. G. Langdon, Creep and Fracture of Engineering Materials and Structures Ed. B. Wilshire, D. R. J. Owen, Proceedings of the International Conference held at University College, Swansea, 24—27. March, 1981.
6. D. A. Woodford, Trans. Quart. ASM. 62, 291, 1969.
7. W. B. Morrison, Trans. Met. Soc. AIME, 242, 2222, 1968.
8. I. Kovács, Magyar Fizikai Folyóirat, 29, 187, 1981.
9. R. Kutschej, H. P. Stüwe, Z. Metallkde, 68, 66, 1980.
10. D. M. R. Taplin, G. L. Dunlop, T. G. Langdon, Ann. Rev. Mater. Sci. 9, 151, 1979.
11. L. K. L. Falk, G. L. Dunlop, T. G. Langdon, Elektron Microscopy 1980, (7th European Cong. on Electron Microsc.) 1, 154.
12. M. P. Stüwe, Z. Metallkde. 61, 704, 1970.
13. J. Weertman, Trans. Metall. Soc. A. I. M. E. 227, 1475, 1967.
14. P. Tasnádi, Magyar Fizikai Folyóirat.
15. M. F. Ashby and R. A. Verrall, Acta Met. 21, 149, 1973.
16. I. Főzy, A. Juhász, P. Tasnádi, Magyar Fizikai Folyóirat. 32, 427, 1984.
17. R. C. Gifkins, J. Mater. Sci, 13, 1926, 1978.
18. R. C. Cook and N. R. Risebrough, Scripta Met. 2, 487, 1968.
19. A. Juhász, Magyar Fizikai Folyóirat, 26, 543, 1978.
20. H. Gleiter, E. Hornbogen and G. Baro, Acta Met. 16, 1053, 1968.
21. I. Főzy, A. Juhász, P. Tasnádi, Magyar Fizikai Folyóirat (megjelenés alatt).
22. G. L. Dunlop and P. R. Howell, Proceedings of the 2nd Rysø International Symposium on Metallurgy and Material Science, Deformation of Polycrystals: Mechanisms and Microstructures. Sept. 14—18. 1981. Eds. N. Hansen et al. Rys National Laboratory, p. 261.

23. *P. R. Howell and G. L. Dunlop*, Creep and Fracture of Engineering Materials and Structures, Proceedings of the International Conference held at University College, Swansea, 24—27. March 1981. p. 127.
24. *A. Ball and M. M. Hutchinson*, *Met. Sci. J.* 3, 1, 1969.
25. *A. K. Ghosh*, Deformation of Polycrystals: Mechanism and Microstructures, Proceedings of the 2nd Rysø International Symposium on Metallurgy and Materials Science. Sept. 14—18. 1981. Eds. *N. Hansen et al.* Rysø National Laboratory, p. 277.
26. *B. M. Watts, N. J. Stowell, B. L. Baikie and D. G. E. Owen*, *Metal Sci.* 189. 1976.
27. *P. Griffiths and C. Hammond*, *Acta Met.* 20, 935, 1972.

11. DEFORMÁCIÓS IKRESEDÉS FELÜLETENCENTRÁLT KÖBÖS FÉMEKBEN

RAJKOVITS ZSUZSA

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOM

1. Bevezetés	537
2. A deformációs ikrek kialakulásának kísérleti bizonyítékai	538
3. Az ikerkristály definíciója	539
4. A mechanikai ikrek geometriája	540
4.1. Az ikresedés jellemző paraméterei	540
4.2. Az ikresedés geometriája atomi skálán	541
5. A deformációs ikresedés modelljei	543
5.1. „Pólus” mechanizmusok	543
5.2. Nukleációs modell	544
5.3. A csúszás-iker kölcsönhatás	546
6. Az ikresedéshez szükséges feszültség meghatározása	548
7. Összefoglalás	549
8. Irodalom	550

1. BEVEZETÉS

Különböző fémekről készült metallográfiai képeken gyakran figyelhetünk meg igen egyenes határokkal elválasztott tartományokat. Az anyag szerkezetvizsgálatából (röntgen, elektrondiffrakció) megállapíthatjuk, hogy a határ két oldalán levő szemcse ikerorientációban van.

Ikerkristályok kialakulására igen eltérő körülmények között nyílik lehetőség. Az alakított fémek hőkezelésekor a rekrisztallizációs folyamatban ún. *hőkezelési ikrek* képződnek. A hőkezelési ikrek a szemcsehatár mozgás során alakulnak ki. A folyamat hajtóereje az ikerhatár kis fajlagos határfelületi energiájából származik [1]. Gyakran már az egyszerű öntött szerkezetben is kialakuló, a folyékony fém dermedése kapcsán keletkező ikrek az ún. *kongenitális ikrek*. A fémek alakítása során szerkezetüktől függő mennyiségben s az alakítás körülményeitől függően az alakítási keményedésben szerepet játszó ikresedési folyamattal képződnek az ún. *mechanikai*, vagy *deformációs ikrek*. A hexagonális fémek alakítása során deformációs ikrek gyakran megjelennek, a tércentrált köbös (tck) fémek alakításakor is, jellemző deformációs mód az ikresedés. Kezdetben azt gondolták, hogy a felületen centrált köbös (fck) fémek alakításakor csupán a csúszás a jellemző deformációs mechanizmus. A deformálás körülményeit, s az anyagok minőségét változtatva azonban bebizonyosodott, hogy az fck fémek esetében csak alacsony hőmérsékleten (néhány K) végrehajtott deformációkor tűnnek fel ikerhatárok, vagy nagy alakítási sebesség alkalmazásakor jellemző az iker a szerkezetben. Az fck fémek rétegződési hibaenergiájának (RHE) függvényében különböző külső feszültségeknél tapasztalható megjelenésük. A továbbiakban csak az fck fémekben kialakuló deformációs ikresedéssel foglalkoznak.

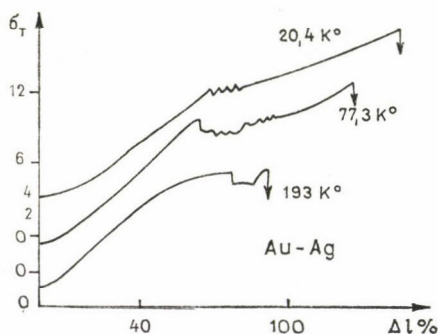
2. A DEFORMÁCIÓS IKREK KIALAKULÁSÁNAK KÍSÉRLETI BIZONYÍTÉKAI

Sokáig azt gondolták, hogy a deformációs ikresedés, mint a plasztikus deformáció egy mechanizmusa fck fémek alakításakor nem játszik szerepet az alakítási keményedésben. *Blewitt* és *munkatársai* nagytisztaságú réz alakítása során 1957-ben tapasztalták először a deformációs ikresedést [2]. A tiszta anyagok egykristályait deformálva általában a nagy rétegződési hiba energiájuk miatt nem keletkeztek deformációs ikrek. Az ötvözetek alakítása kapcsán jelenlétük már egyre nyilvánvalóbbá vált.

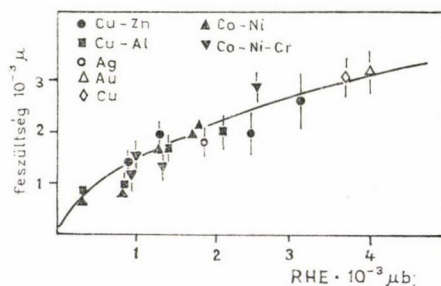
Mint ismeretes a plasztikus deformáció nyírási folyamattal megy végbe. Az alakítás a fém kristályszerkezetétől függő csúszási rendszerek aktiválódásával értelmezhető. Az alakítás megindul, ha a külső feszültség eléri a kritikus csúsztató feszültséget egyzerű csúszás esetén.

Az ikresedés, mint később látni fogjuk, fck fémekben nagy kritikus csúsztató feszültségnél valósul meg. Ez az oka annak, hogy szobahőmérsékleten nem ez a jellemző deformációs mechanizmus.

Az ikresedés egyik kísérleti vizsgálata a feszültségdeformáció összefüggés analízisa volt. Az 1. ábrán különböző hőmérsékleten felvett $\sigma - \varepsilon$ görbéket láthatunk. A görbéken látható feszültségesés az ikresedés kezdetét jelöli, s párhuzamos metallográfiai vizsgálatot végezve makroszkópos ikersáv megjelenését tapasztalhatjuk [3]. Az ikerkristályok az ikerhatár két oldalán levő szemcsékben létrehozott maratási gödrök vizsgálatával is azonosíthatók, míg a leggyakrabban használt és legmeggyőzőbb vizsgálatmód a röntgen és az elektrondiffrakció alkalmazása.



1. ábra. A folyási feszültség változása ikresedés során



2. ábra. Az ikresedési feszültség függése a rétegződési hiba energiától különböző ötvözetek esetén

A sok kísérleti vizsgálatból kiderült, hogy az fck fémekben az ikresedés nem annyira jellemző deformációs mód, mint a csúszás, de egyre több iparilag fontos ötvözetben is előfordul [4].

A 2. ábra az ikresedéshez szükséges kritikus csúsztató feszültséget tünteti fel az anyagok RHE-nak függvényében. Az ábrából láthatjuk, hogy elég nagy feszültséget alkalmazva az ikresedés mint deformációs mechanizmus az alakítási keményedésben jelentőssé válhat [4].

Az ikrek jelenléte az alakított mintákban a plasztikus deformáció terjedése szempontjából is fontos tényező. Az ikerhatárok ugyanis komoly akadályai a csúszással kapcsolatos diszlokáció mozgásnak. A csúszó diszlokáció az ikerhatárral diszlokáció reakcióval leírható kölcsönhatásban vesz részt, mely folyamat az alakítási keményedési sebesség növekedésében jelentkezik. Az ikrek jelenléte szerepet játszik továbbá a törés kialakulásánál is. Az ikerhatárnál előforduló feszültségkoncentráció a határnál repedés nukleálódását eredményezheti, mely töréshez vezethet. Az ikreszedésnek a törésre való hatása azonban még nem egészen tisztázott terület [4].

Roberts 1964-ben acél transzmissziós elektronmikroszkópos (TEM) vizsgálatával is kimutatta a deformációs ikrek jelenlétét [5].

Az észlelt nagy alakítási keményedési sebességet az ikerhatárban levő nagy diszlokáció sűrűségnek tulajdonította.

Az alakítás során tehát képződhetnek ikerkristályok, s a keletkező ikerhatárok a plasztikus deformáció terjedése szempontjából akadályokként veendő figyelembe. Egyrészt fontos ismernünk a deformációs ikreszedés mechanizmusát, másrésztől a már meglévő ikerhatárok hatását a csúszásra és ikreszedésre, mint deformációs mechanizmusra. A csúszás-iker (slip-twin) és az iker-iker (twin-twin) kölcsönhatás ismeretében világosabb képet alkothatunk arról, hogy a deformációs ikreszedés milyen szerepet kap az anyag mechanikai tulajdonságának kialakításában.

3. AZ IKERKRISTÁLY DEFINÍCIÓJA

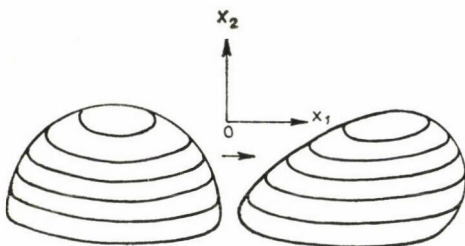
Az ikreszedés alacsony hőmérsékleten és nagy deformációs sebesség alkalmazása esetén válhat dominánssá. A csúszáshoz hasonlóan az ikreszedés is számottevő térfogatváltozás nélkül lejátszódó folyamat. A csúszástól eltérően az ikreszedés mindig azonos mértékű nyírási deformációval jellemezhető, melynek nagyságát a kristály szerkezete határozza meg.

Az ikreszedett kristály két részből áll. A nagyobb részt általában a *mátrix* alkotja, mely teljesen körül is veheti az ikret. Az iker orientációját a mátrix meghatározza. Kétféle viszonyt állapíthatunk meg a mátrix és az iker között. Az I. típus esetén az iker egyszerű tükörképe a mátrixnak, a tükörsík egy jellemző kristálytani sík. A II. típus esetén az iker orientációját úgy képzelhetjük el, mint a mátrix képét, amelyet egy jellemző sík pólusa körüli 180° -os elforgatással hozunk létre. A síkot kompozíciós síknak s a síkban levő irányt, mely körül a forgatás történt η_1 iránynak nevezzük. A deformációs iker kialakulása az eredeti kristály nyírásával kapcsolatos. Az a kristályfelület, mely sík volt az alakítás előtt, az ikreszedés után is sík marad. A minta felületének vizsgálatával az ikerképződésre következtethetünk. Az ikreszedés után ugyanis a minta felületén a mechanikai ikerrel való metszés kapcsán egy lépcső keletkezik. A lépcső geometriájából a nyírás nagysága és iránya megadható.

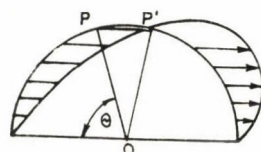
4. A MECHANIKAI IKREK GEOMETRIÁJA

4.1. Az ikresedés jellemző paraméterei

Egy félgömb alakú deformálatlan kristály deformációjakor a csupán nyírással keletkezett mechanikai ikresedés kapcsán a félgömb félellipszoid formát ölt (3. ábra) [6]. A 3. ábrán látható félgömbön e_{12} egyenletes nyírást végzünk. Az OX_1 az η_1 iránynak felel meg és OX_2 a K_1 síkra merőleges irányt jelöli. A nyírás folyamán minden K_1 sík elmozdul az η_1 irányban. Az elmozdulás mértéke arányos a síknak a félgömb középpontjától mért távolságával.



3. ábra. Félgömb deformációja ikresedéssel



[OX_3 merőleges a papírra]

4. ábra. Az alakított ellipszoid a deformálatlan félgömbbel együtt

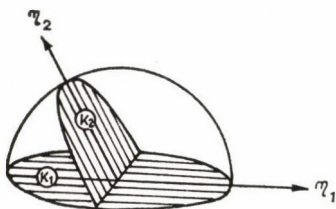
Megjegyezzük, hogy a sík mérete és alakja nem változik a nyírás folyamán, ezen síksereg tagjai az első torzulásmentes síkok.

A 4. ábrán az ikresedéssel deformált félgömböt a deformálatlan állapottal együtt tüntettük fel. A félgömb OP sugarának orientációja $\overline{OP'}$ -be ment át, úgy, hogy az $\overline{OP'}$ szakasz hossza változatlan maradt a nyírás folyamán. Az \overline{OP} szakasz és az OX_3 tengely által meghatározott K_2 sík az ún. második torzulásmentes sík, amely az ikresedés során K_2' -vé orientálódik. A K_2 síkot a félgömb és félellipszoid metszete határozza meg. A félgömbön tehát a 4. ábrának megfelelően egy

$$S = \frac{\overline{PP'}}{\overline{OP} \sin \Theta} = 2 \operatorname{ctg} \Theta \quad (1)$$

mértékű nyírást végeztünk, ahol Θ a K_1 és K_2 sík normálisai által bezárt szög. Szokás még egy jellemző irányt bevezetni, mely a K_2 síkban fekvő, s az OX_3 tengelyre merőleges, η_2 irány.

A mechanikai ikresedést teljes egészében akkor írjuk le, ha a K_1 , η_1 , K_2 , η_2 paramétereket, az ún. *ikresedési elemeket* ismerjük. Az 5. ábrán az ikresedési elemeket tüntettük fel. Az ikresedési elemek kísérletileg meghatározhatók. Értéküket különböző szerkezetekre az I. táblázatban foglaltuk össze. Az ikresedési elemeket a minták felületén a deformációs ikresedés okozta lépcsők optikai vizsgálatával határozhatjuk meg. A négy paraméter nem független egymástól, K_1 és η_2 ismeretében a másik két paraméter már megadható [6].



5. ábra. Az ikresedési elemek

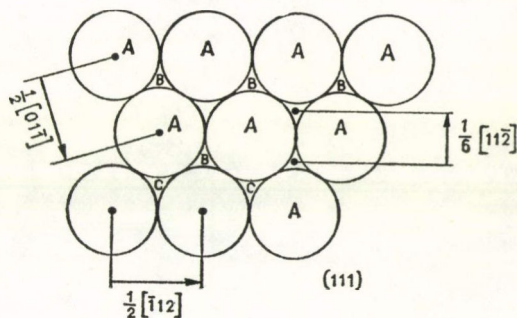
1. TÁBLÁZAT

Kristályszerkezet	K_1	K_2	η_1	η_2	S
fck	111	11 $\bar{1}$	11 $\bar{2}$	11 $\bar{2}$	$1/\sqrt{2}$
bck	112	$\bar{1}\bar{1}2$	$\bar{1}\bar{1}1$	111	$1/\sqrt{2}$
hexagonális	10 $\bar{1}2$ 11 $\bar{2}1$ 11 $\bar{2}2$	10 $\bar{1}\bar{2}$ 0001 11 $\bar{2}4$	$\bar{1}011$ 11 $\bar{2}6$ 11 $\bar{2}3$	10 $\bar{1}1$ 11 $\bar{2}0$ 22 $\bar{4}3$	$\left(\frac{c}{a}\right)^2 - 3$ $\frac{c}{a}\sqrt{3}$
Alfa urán (orthorombos)	130 172	1 $\bar{1}0$ 112	3 $\bar{1}0$ 312	110 3 $\bar{7}2$	0,299 0,228
fc tetragonális	101	10 $\bar{1}$	10 $\bar{1}$	101	$\left(\frac{c}{a} - \frac{a}{c}\right)$

S a nyírás mértéke

4.2. Az ikresedés geometriája atomi skálán

Az előző pontban említett K_1 jelű síkok az anyag legszorosabb illeszkedésű síkjai. Az fck fémek esetén a legszorosabb illeszkedésű síkok az $\{111\}$ Miller indexű síkok. Az ikresedés ezen síkok meghatározott η_1 irányú és mértékű elmozdulásával kapcsolatos. Mielőtt meghatároznánk az η_1 irányt fck fémekre, tekintsük át a szoros illeszkedésű rétegek sorrendjét az fck szerkezetben. A 6. ábrán a gömbök jelképezik az (111) síkot. A következő síkban az atomok a B jelzésű, az azt követő síkban a C jelzésű hely fölött helyezkednek el. A rétegek tehát $ABCABC$ sorrendben követik egymást. A rétegződés a fenti sorrendtől eltérhet, az anyagban ún. rétegződési hiba alakulhat ki. Az anyagban végződő rétegződési hibát (RH) parciális diszlokáció határolja. Rétegződési hibát többféle módon kialakíthatunk. Egy rácssíkot eltávolítva, vagy a rétegeket egymáshoz képest $b = \frac{1}{6} [11\bar{2}]$ mértékben eltolva (B helyzetből a C -be) ún. in-



6. ábra. A szoros illeszkedésű síkok sorrendje fck fémekben

trinsic v. I. típusú RH-t kapunk. A rétegek sorrendje ekkor $ABCACABC$, vagy ún. rétegoperátorral jelölve $\Delta\Delta\Delta V\Delta\Delta\Delta$. Egy rácssík betolása ún. extrinsic v. II. típusú RH keletkezésével jár, melyet $ABCACBCABC$, illetve $\Delta\Delta V V\Delta\Delta$ rétegződési sorrend jellemez. Ennél a RH-nál két „hibás” réteg figyelhető meg.

elő. Fcc fémekben például a teljes diszlokáció a

$$\frac{1}{2} [\bar{1}10] \rightarrow \frac{1}{6} [\bar{2}11] + \frac{1}{6} [\bar{1}2\bar{1}] \quad (2)$$

reakció szerint két parciálissá disszociálhat.

Az fcc fémek csúszási rendszereit az ún. Thompson tetraéderen ábrázolhatjuk. A Thompson tetraéderről a csúszó *teljes* diszlokációk és a *parciális* diszlokációk közötti jellemző diszlokáció reakciók is leolvashatók (7. ábra) [7].

A fentiek segítségével már egyszerűen látható, hogy az $\{111\}$ Miller indexű síknak az $\frac{1}{6} [112]$ irányban történő elmozdításával hozhatunk létre egyrétegű ikret

fcc fémekben. A jellemző η_1 irány tehát az $\frac{1}{6} [11\bar{2}]$ vektorral adható meg. Ennek ismeretében kiszámíthatjuk az ikresedést jellemző nyírás mértékét egy atomsíkra vonatkoztatva. A szomszédos rétegek távolsága $b = \frac{a}{3} [111]$, a síkban történő elmozdulás

a $b = \frac{a}{6} [11\bar{2}]$ vektorral adható meg. A nyírás tehát a

$$\gamma = \frac{a/\sqrt{6}}{a/\sqrt{3}} = \frac{1}{\sqrt{2}} = 0,707 \quad (3)$$

nagyságú. (Bcc fémekre is ez az érték adódik, lásd 1. táblázatot.)

A csúszáshoz hasonlóan az ikresedést is ikresedési rendszerekkel jellemezhetjük. Az fcc fémekben az $\{111\} \langle 112 \rangle$ ikresedési rendszerek a jellemzőek. Amennyiben a külső feszültség a meghatározott ikresedési rendszerre jellemző kritikus csúsztató feszültségét eléri, a deformáció ikresedéssel valósul meg. 12 darab $[112]$ (111) típusú ikresedési rendszert különböztethetünk meg.

5. A DEFORMÁCIÓS IKRESEDÉS MODELLJEI

Jelenleg nem ismeretes pontosan az a mechanizmus, amellyel a deformáció során az ikrek nukleálódnak és növekednek. A folyamat leírására kétféle megközelítés ismeretes. Az egyik elképzelés *Orowan*-tól származik, aki az anyagban található nagyfeszültségű tartományokban keresi az ikrek keletkezését [9]. A másik elképzelés szerint az ikrek bizonyos diszlokációelrendeződéssel kapcsolatos heterogenitásokon nukleálódnak [10, 11].

Vizsgáljuk meg részletesebben az iker kialakulást értelmező néhány modell jellegzetes vonásait.

5.1. „Pólus” mechanizmusok

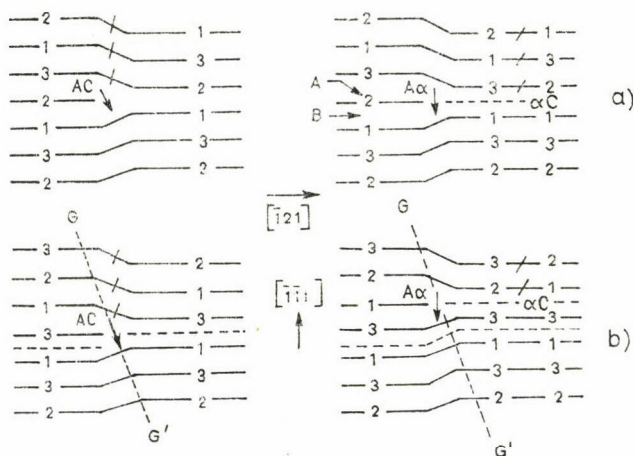
Az ún. pólus mechanizmus a csúszó teljes diszlokációk olyan reakcióival kapcsolatos, amelyeknek eredményeként egy a csúszósíkra merőleges Burgers-vektorú, ún. rögzült diszlokáció és egy rétegződési hiba kialakítására képes, a csúszósíkban mozgó parciális diszlokáció jön létre. A pólust a reakció helyén rögzült diszlokáció képezi. Bcc fémek ikresedésére *Cottrell* és *Bilby* javasolt pólus mechanizmust [8],

míg az fcc fémekben lejátszódó ikresedés egyik pólus modelljének kidolgozása *Venables* nevéhez fűződik [10].

Az ikresedési rendszerek ismeretében *Venables* az ikresedést a következő módon értelmezi. Egy iker kialakulásához mindenképpen egy a primer csúszási síkban mozgó diszlokáció disszociációja vezethet. Ez a primer csúszósíkban fekvő diszlokáció lehet például a konjugált csúszási rendszerekben mozgó diszlokációkon képződött lépcső, amely az

$$\frac{1}{2} [110] \rightarrow \frac{1}{3} [111] + \frac{1}{6} [11\bar{2}] \quad (4)$$

reakció szerint bomolhat parciális diszlokációkra. Mint a korábbiakban láttuk már, az egyenletben szereplő első diszlokáció rögzült, Frank-féle parciális, míg a második a csúszósíkban mozogni képes Shockley parciális diszlokáció. Ez utóbbi a rögzült diszlokáció körüli forgás során egy csúszási hurkot eredményez. Az anyag egy részén tehát egy egyrétegű iker jön létre. A további síkokra kiterjedő ikerhatárképződés (az iker szélesedése) úgy jön létre, ha feltesszük, hogy a Shockley parciális egy körülfordulás után újra egyesül a Frank parciállal az eredeti teljes diszlokációvá, mely kúszással egy következő síkra kerülhet. Ezen a síkon azután újra disszociálva, a folyamat ismétlődésével szélesedik az iker (8. ábra).



8. ábra. (a) Az AC teljes diszlokáció $A\alpha$ és αC diszlokációkra bomlásával kapcsolatos egyrétegű iker kialakulása
(b) Két ikerreteg kialakulásának modellje

5.2. Nukleációs modell

Mahajan és *Chin* az ikresedést nukleációval és a nukleusok növekedésével értelmezi [12]. Modelljükben az ikernukleusok ún. háromrétegű ikerembriókból alakulnak ki a minta azon helyein, ahová a csúszás lokalizálódik. A különböző helyeken képződött nukleusokból véletlen egyesüléssel jön létre a szélesebb ikerkristály. A háromrétegű iker kialakulása a következőképpen történhet meg.

Két koplanáris, nem azonos $\frac{1}{2} \langle 110 \rangle$ Burgers-vektorú csúszó diszlokáció között diszlokáció reakció mehet végbe. Pl. a $\pm \frac{1}{2} [\bar{1}01]$ és a $\pm \frac{1}{2} [\bar{1}10]$ Burgers vektorú diszlokáció az (111) síkra kerülve a következő reakciókban vehet részt (7. ábra). Az (111) síkon az

$$\frac{1}{2} [\bar{1}01] + \frac{1}{2} [1\bar{1}0] \rightarrow \frac{1}{2} [0\bar{1}1] \quad (5)$$

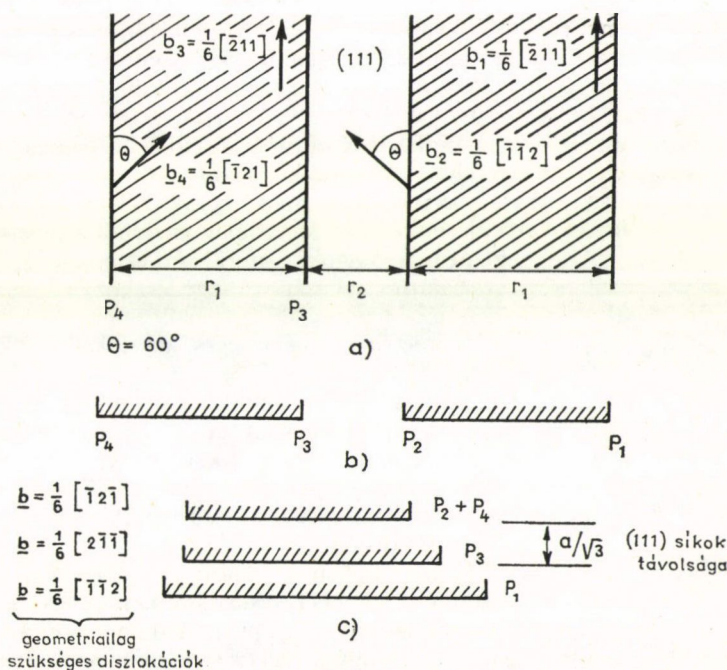
reakció szerint egy teljes diszlokáció keletkezik. Ez reakcióba léphet az első diszlokációval az

$$\frac{1}{2} [\bar{1}01] + \frac{1}{2} [0\bar{1}1] \rightarrow 3 \times \frac{1}{6} [\bar{2}11] \quad (6)$$

reakcióval, amely három parciális diszlokációt eredményez. Ezek képezik a három-rétegű iker forrását.

A két reakcióba lépő teljes diszlokációból az alábbi módon fokozatosan is kialakulhat a három parciális. Az

$$\frac{1}{2} [\bar{1}01] \rightarrow \frac{1}{6} [\bar{2}11] + \frac{1}{6} [\bar{1}\bar{1}2] \quad (7)$$



9. ábra. A nukleációs modellben szereplő, teljes diszlokációk parciálisokká bomlása

és az

$$\frac{1}{2} [\bar{1}10] \rightarrow \frac{1}{6} [\bar{2}11] + \frac{1}{6} [\bar{1}2\bar{1}] \quad (8)$$

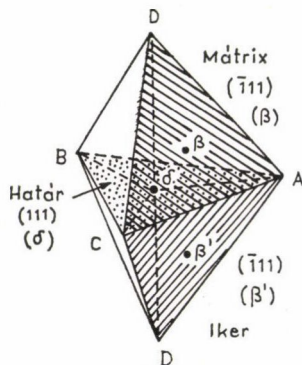
reakciók három eltérő Burgers- vektorú parciális diszlokációt eredményeznek. A 9. ábrán az (111) síkban rajzoltuk be a fenti parciálisokat. Két-két parciális diszlokáció között r_1 távolságra kiterjedő rétegződési hiba található. A két kiterjedt diszlokáció r_2 távolságra közelítheti meg egymást. A parciálisok közötti (itt nem részletezendő) kölcsönhatások eredményeképpen a P_1 , P_3 és $P_2 + P_4$ parciálisok egymás fölött elhelyezkedő (111) síkokba kerülnek, e három hibás réteg alkotja az ikernukleust [12]. A három, különböző síkokon található parciális diszlokáció csúszó mozgásával terjedhet az ikernukleus egyre nagyobb tartományokra. A 9. ábrán látható háromrétegű hibástartomány bal oldalán geometriailag szűkséges diszlokációk jelennek meg, melyek a hiba terjedését ebben az irányban megakadályozzák. Mivel a rétegződési hiba jelenléte hosszú hatótávolságú elektron perturbációt eredményez az anyagban, emiatt a háromrétegű ikernukleusok egymás szomszédságában alakulnak ki, eloszlásuk lokalizálódik. A közel kialakult nukleusok ezután növekedve egy nagyobb ikerré alakulhatnak. A szerzők modelljük helyességét kísérletileg TEM vizsgálattal támasztották alá [12].

5.3. A csúszás-iker kölcsönhatás

Az ikresedés szempontjából hasznos információkhoz jutunk, ha ismerjük a csúszó diszlokációk és az anyagban már meglevő ikerhatárok kölcsönhatását.

Sleeswyk és *Verbraak* foglalkozott a csúszás és iker kölcsönhatással bcc fémekben, s megállapította, hogy a csúszó diszlokáció mozgása során behatolhat az ikerhatárba. A csúszó diszlokáció és az ikerhatár között diszlokáció reakció játszódhat le [13]. Fcc fémek esetére ezt a módszert Rémy alkalmazta [14].

Az anyag alakítása során a csúszó diszlokáció az ikerakadályba ütközik. Tekintjük át röviden a csúszás-iker kölcsönhatás geometriáját, melyből a lehetséges diszlokáció reakciókra is következtethetünk. Ehhez a vizsgálathoz hasznos segédeszköz az ún. kettős Thompson tetraéder, melyről könnyen leolvashatók a geometriailag lehetséges diszlokációreakciók (10. ábra) [4].



10. ábra. Kettős Thompson tetraéder az iker-mátrix orientációviszonyok meghatározásához. Az (111) sík a koherens ikerhatár

Fcc fémekben mind a csúszás, mind az ikresedés síkja az $\{111\}$ Miller indexű síksereg. Emiatt a csúszási sík az ikresedési síkkal csak $\langle 110 \rangle$ irányú metszésvonalat adhat. Ennek megfelelően az ikerben a lehetséges relaxációs síkok is az $\{111\}$ síkok, a csúszó-síkok tükörképei.

Vizsgáljuk meg ezután egy (111) koherens ikerhatár és egy $(\bar{1}11)$ csúszó síkban mozgó diszlokáció kölcsönhatását (10. ábra). A Thompson tetraéderből láthatjuk, hogy a $(\bar{1}11)$ síkon mozgó diszlokáció Burgers vektora a $\pm \frac{1}{2} [01\bar{1}]$, $\pm \frac{1}{2} [110]$, és $\pm \frac{1}{2} [101]$

irányú lehet. Az első diszlokáció Burgers vektora párhuzamos a csúszó sík és az ikerhatár metszésvonalával, a többi $\pi/3$ szöget zár be ezzel. Az első diszlokáció tehát átcúsúzhat egyszerűen az iker $(\bar{1}11)_T$ síkjára, mely folyamatot az

$$\frac{1}{2} [01\bar{1}] \rightarrow \frac{1}{2} [0\bar{1}1]_T \quad (9)$$

módon jelölhetjük, ahol a T index az ikersíkot jelöli.

A másik két diszlokáció csak a teljes diszlokációk bomlása után juthat az ikerkristály β' síkjára (10. ábra). Az ikerhatárnál a csúszó diszlokációk az

$$\frac{1}{2} [110] \rightarrow \frac{1}{6} [114]_T \quad (10)$$

és

$$\frac{1}{2} [101] \rightarrow \frac{1}{6} [141]_T \quad (11)$$

reakcióknak megfelelően bomlanak fel. A fenti diszlokációk azonban nem csúszhatnak az (111) síkban. Minden nem csúszó diszlokáció egy a síkban csúszó parciálissá és egy a síkon lépcsőként megjelenő parciálissá bomlik. Mindkét diszlokáció olyan disszociációjára, mely az ikerhatárban csúszó parciális eredményez, könnyen írhatunk fel reakciót (kettős Thompson tetraéder) az alábbiak szerint:

$$\frac{1}{2} [110] \rightarrow \frac{1}{2} [110]_T + 2 \times \frac{1}{6} [11\bar{2}] \quad (12)$$

illetve

$$\frac{1}{2} [110] \rightarrow \frac{1}{2} [101]_T + \frac{1}{6} [2\bar{1}\bar{1}]. \quad (13)$$

Az fck szerkezet és a csúszási viszonyok geometriája ugyan lehetővé teszi a (12), (13) reakciókat, de energetikailag kedvezőtlen eredményre vezetnek, mert a (12) szerinti esetben a diszlokációvonal sajátenergiája 133%-kal, míg (13) esetben 33% növekszik [14].

Egy vékony hőkezelési ikerkristály és a csúszó diszlokáció kölcsönhatása TEM és diffrakciós vizsgálattal követhető. A mátrixban, a hőkezelési ikerben és az ikerhatárban található diszlokációk Burgers vektorainak a meghatározásával Rémy lehetséges diszlokáció reakciónak a

$$\frac{1}{2} [110]_{(\bar{1}11)} \rightarrow \frac{1}{2} [101]_{T(\bar{1}11)_T} + \frac{1}{6} [2\bar{1}\bar{1}] \quad (14)$$

folyamatot tartja. Ez a reakció a mátrixban levő $\frac{1}{2} [110]$, a hőkezelési ikerben levő $\frac{1}{2} [101]_T$ és az ikerhatárban fekvő $\frac{1}{6} [2\bar{1}\bar{1}]$, Burgers vektorú diszlokációkat tartalmazza. A (14) reakció, mint látható, a (13)-mal azonos, de feszültség hatására az említett energetikai viszonyok ellenére ez a folyamat lejátszódhat.

Egy energetikailag kedvező, lehetséges reakció az

$$\frac{1}{2} [110] \rightarrow \frac{1}{3} [111] + \frac{1}{6} [11\bar{2}] \quad (15)$$

szerinti parciálisokra való bomlás is. Az ikerhatárban az $\frac{1}{3} [111]$ rögzült diszlokáció helyett külső feszültség hatására olyan diszlokáció alakul ki, mely valamely kristálytani síkban csúszó mozgásra képes. A külső feszültség jelenléte tehát az energiavesztés ellenére a (14) reakciót részesíti előnyben a (15)-tel szemben [4].

A koherens ikerhatár egyike a legszimmetrikusabb koincidens határnak. A csúszó rácsdiszlokáció és a szemcsehatár kölcsönhatását vizsgálhatjuk abból a szempontból is, hogy milyen Burgers vektorú szemcsehatár diszlokációk alakulhatnak ki az adott koincidenciájú határban. A Bollmann-féle szemcsehatár elmélet felhasználásával a lehetséges diszlokációreakciók általánosabban vizsgálhatók [4].

6. AZ IKRESEDÉSHEZ SZÜKSÉGES FESZÜLTSG σ_T MEGHATÁROZÁSA

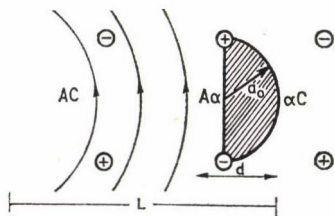
Az ikresedés megindulásához szükséges σ_T ikresedési feszültséget egy egyszerű modell alapján megbecsülhetjük. Kísérleti tapasztalatokból ismerjük (2. ábra) az ikresedési feszültség és a rétegződési hiba energia, a $\sigma_T - \gamma$ kapcsolatot. Az alábbi modell lehetőséget nyújt a $\sigma_T - \gamma$ összefüggés számolására.

Egy rétegződési hiba kialakításához, melyet b_1 Burgers vektorú diszlokáció „húz” maga után, $p = \gamma/b_1$ feszültség szükséges. A feszültség értéke Cu esetén például $p = 47 \text{ kg/mm}^2$, mivel $\gamma = 70 \text{ erg/cm}^2$ rétegződési hibaenergiát kell számításba vennünk. A Cu-re vonatkozó deformációs vizsgálatokból azonban tudjuk, az ikresedés már $\sigma_T = 15 \text{ kg/mm}^2$ külső feszültség mellett megvalósul [3].

Az iker megjelenéséhez tehát az ikerforrás körül kialakuló, lokális feszültség koncentrációra van szükség. A lokális feszültség koncentrációt okozhatja diszlokáció felhalmozódás, mely az ikresedési síkon a forrás körül összegyűlt azonos Burgers vektorú diszlokációkkal kapcsolatos.

A $\sigma_T - \gamma$ összefüggés számolása a 11. ábrán látható modell alapján történik.

Az iker nukleálódása szempontjából kritikus pont egy félkör alakú rétegződési hiba kialakulása. Az ikresedési feszültség ebben a kritikus állapotban σ_T érték. Az a_0 sugarú diszlokációforrás működése, s a rétegződési hiba létrehozása a



11. ábra. Modell a σ_T ikresedési feszültség és a γ rétegződési hiba energia összefüggésének számolásához (Aα Frank, αC Shockley parciális diszlokáció, AC teljes diszlokációk)

$$n\sigma_T = \frac{\gamma}{b_1} + \frac{\mu b_1}{2a_0} \quad (16)$$

feszültséggel biztosítható. Az n a lokális feszültség koncentráció faktora, a_0 a forrás sugara és μ a nyírási modulusz. Az ikerforrás mögött L távolságon összegyűlt diszlokációk képezik a feltorlódott halmazt (11. ábra).

A deformációnak csúszással való megvalósulá-

sához szükséges kritikus csúsztató feszültség hatására a diszlokációk d távolságra hajolhatnak ki a $2a_0$ méretű diszlokációforrás körül.

A forrás méretének meghatározásához képzeljük el, hogy az ikresedés síkját ellentétes Burgers vektorú diszlokációk döfik, emiatt a forrás mérete arányos a síkot döfő diszlokációk távolságával. A mintában a σ külső feszültséggel kapcsolatos N diszlokáció sűrűség határozza meg az ikerforrás a_0 méretét az

$$a_0^2 = \frac{3}{4N} \quad (17)$$

összefüggés szerint. A fentiek felhasználásával a diszlokáció a forrás körül a

$$d = \frac{1,84 \cdot b^2 \mu^2}{2\pi^2(1-\nu)^2 L \sigma^2} \quad (18)$$

kifejezéssel megadható mértékben hajlik ki [3]. Kis d távolság esetén a feszültségkoncentráció számolásánál élhetünk azzal az egyszerűsítéssel, hogy a feltorlódott diszlokációk első tagjától származó feszültséget vesszük figyelembe az

$$n\sigma_T = \sigma_T + K\sigma^2 \quad (19)$$

összefüggés alapján, ahol

$$K = \frac{(1-\nu)L}{1,84\mu b}. \quad (20)$$

A folyás feszültség és diszlokációsűrűség között a

$$\sigma = 0,5\beta\mu b N^{1/2} \quad (21)$$

összefüggés áll fel, ahol β értéke közelítőleg egynek vehető. Ezek után a $\sigma_T = \theta\sigma$ arányosság feltételezésével, s a fenti összefüggések felhasználásával, a γ RHE és σ_T ikresedési feszültség között a

$$\left\{ \left(1 - \frac{2\theta}{3\beta} \right) + K\theta^2\sigma_T \right\} \sigma_T = \frac{\gamma}{b_1} \quad (22)$$

összefüggés adódik [3].

A $\theta = \beta = 1$ értékeket a (22) egyenletbe behelyettesítve, az így kapott kifejezés a 2. ábrán látható kísérleti görbékkel jó egyezést mutat.

7. ÖSSZEFOGLALÁS

A deformációs ikresedésről, mint deformációs mechanizmusról adtunk áttekintést felületcentrálalt köbös fémek esetére. A mechanikai ikrek definíciója után bevezettük az ikresedési elemeket, mint az ikresedésre jellemző paramétereket. A deformációs ikrek geometriai leírása a rétegződési hibák kialakulásának lehetőségei kapcsán történt. Foglalkoztunk az ikresedés néhány modelljével is. Végül egy egyszerű modell alapján meghatároztuk az ikresedési feszültség és a rétegződési niba energia közötti kapcsolatot.

IRODALOM

1. R. L. Fullman and J. C. Fisher, J. Appl. Phys., 22, 1350, 1951.
2. T. H. Blewitt, R. R. Coltman and J. K. Redman, J. Appl. Phys., 28, 651, 1957.
3. J. A. Venables, Deformation Twinning, ed. J. P. Hirth, Gordon and Breach, New York, 1964, p. 77.
4. L. Rémy, Metallurgical Transaction, 12A, 387, 1981.
5. W. N. Roberts, Trans. TSM—AIME, 230, 372, 1964.
6. C. N. Reid, Deformation Geometry for Materials Scientist, Pergamon Press, Oxford, New York, 1973. p. 180.
7. Kovács I. és Zsoldos L., Diszlokációk és képlékeny alakváltozás, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1965. p. 138.
8. A. H. Cottrell and B. A. Bilby, Phil. Mag. 42, 573, 1951.
9. E. Orowan, Dislocation in Metals, ed. M. Cohen, AIME, 1954. p. 116.
10. J. A. Venables, Phil. Mag., 6, 379, 1961.
11. J. B. Cohen and J. Weertman, Acta Met., 11, 997, 1963.
12. S. Mahajan and G. Y. Chin, Acta Met. 21, 1353, 1973.
13. A. W. Sleeswyk and C. A. Verbraak, Acta Met. 9, 917, 1961.
14. L. Rémy, Acta Met. 25, 711, 1977.

12. REPEDÉSKÉPZŐDÉS ÉS TÖRÉS

KOVÁCS ISTVÁN

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOM

1. Bevezetés	551
2. Az elméleti szakítószilárdság	551
3. A kristályos testek törési módjai	553
3.1. Rideg törés	553
3.2. Szívós (képlékeny) törés	554
3.3. A képlékeny és rideg anyagok összehasonlítása	554
4. Repedések keletkezésére vezető diszlokációs mechanizmusok	556
4.1. Repedés keletkezése szemcsehatár mentén	557
4.2. Repedés keletkezése szemcsék (egykristályok) belsejében	558
5. Összefoglalás	561
6. Irodalom	561

1. BEVEZETÉS

A szilárd anyagok makroszkopikus képlékeny alakíthatósága első közelítésben két alapvető paraméterrel, a folyáshatárral és a törést előidéző feszültséggel (szakítószilárdsággal) jellemezhető. A szilárdtestek e két paraméterrel kapcsolatos tulajdonságai rendkívül széles skálán változnak. Vannak anyagok, pl. az arany, amelyeket szívósnak vagy képlékenynek nevezünk, mert a folyáshatár és a szakítószilárdság jelentősen különbözik, továbbá az elszakadásig a megfolyás után nagy mértékű képlékeny alakváltozás megy végbe. Ugyanakkor más anyagok, mint a gyémánt, ridegek, mert gyakorlatilag nem alakíthatók képlékenyen, vagyis a terhelő feszültség növekedésekor azonnal a törés következik be.

E két tulajdonságról sokáig azt hitték, hogy teljesen függetlenek egymástól. Mindegyikhez tartozik egy az anyagra jellemző feszültség, és az anyagok a fenti két csoportba sorolhatók aszerint, hogy a folyáshatár és a szakítószilárdság között lényeges különbség van-e vagy sem. Az újabb vizsgálatok azonban azt mutatják, hogy a két tulajdonság között többnyire meghatározott kapcsolat van. A jelen dolgozat célja ezen kapcsolatra utaló néhány jelenség áttekintése.

2. AZ ELMÉLETI SZAKÍTÓSZILÁRDSÁG

Ha egy tökéletes kristályra valamely csúszósíkjával párhuzamos τ nyírófeszültséget alkalmazunk, akkor egyszerűen belátható, hogy a maradó alakváltozás létrehozásához

$$\tau \cong \frac{\mu}{30} \cong \frac{E}{100} \quad (1)$$

nagyságú feszültség szükséges, ahol μ a kristály nyírási, E a Young modulusza [1]. A tapasztalat szerint azonban a képlékeny alakváltozás megindulásához szükséges feszültség ennél sokkal kisebb, egykristályok esetén $10^{-5} \mu$ is lehet és polikristályoknál sem haladja meg a $10^{-3} \mu$ értéket. Taylor, Orowan és Polányi felismerése óta [2–4] jól tudjuk, hogy ennek az az oka, hogy a valódi kristályok sohasem tökéletesek és a képlékeny alakváltozás mechanizmusa vonalmenti kristályhibák, a diszlokációk mozgása által megy végbe [5].

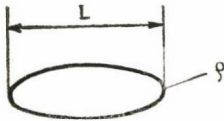
Tekintsük most egy tökéletes egykristály egytengelyű nyújtását valamely rácsállandója mentén. Egy becslést az elméleti szakítószilárdságra úgy kaphatunk, hogy közelítőleg meghatározzuk azt a feszültséget, amely az atomok közti kötőerők szétszakításához szükséges. Ez az erő azzal a γ munkával hozható összefüggésbe, amely a szétszakadáskor kialakuló felületek energiájának kialakításához szükséges. A számítás a következő eredményre vezet [6]:

$$\sigma_{sz}^c \cong \sqrt{\frac{E\gamma}{a_0}}, \quad (2)$$

ahol a_0 a kezdeti rácsállandó. γ értéke közelítőleg $Ea_0/30$ [7], ezért $\sigma_{sz}^c \sim 0,1 E$ nagyságrendű.

A $0,1 E$ érték pl. vas esetén azonban legalább tízszer nagyobb, mint a legerősebb acél valódi szakítószilárdsága. Általában a szívós (polikristályos) anyagok képlékeny alakváltozása megindul $10^{-3} E$ körüli feszültség esetén és eltörik $10^{-2} E$ körül, míg a rideg anyagok törése többnyire már $10^{-3} E$ körüli feszültségeknél bekövetkezik.

Az első magyarázat erre Griffithtől származik.



1. ábra. A Griffith-féle szakítószilárdság meghatározásához

Tekintsük egy σ húzófeszültséggel terhelt testet, amelyben $2L$ nagytengelyű ellipszis keresztmetszetű üreg van a feszültség irányára merőlegesen (1. ábra). A legnagyobb feszültség koncentráció a repedés legkisebb, ρ görbületi sugara részének környezetében lép fel, amelynek értéke [8]:

$$\sigma_m = \sigma \sqrt{\frac{L}{\rho}}. \quad (3)$$

A törés feltétele most az, hogy (3) elérje a (2) elméleti értéket. E két formula összehasonlításából a Griffith-féle szakítószilárdság adódik:

$$\sigma_{sz}^G = \sqrt{\frac{\rho E \gamma}{a_0 L}}. \quad (4)$$

ρ legkisebb értelmes értékének a rácsállandót vehetjük. Ha ehhez még $L = 10^3 a_0$ nagyságú repedés jelenlétét tételezzük fel az anyagban, akkor (4)-ből a ridegtörésnél megfigyelt nagyságrendű szakítószilárdság adódik.

Úgy tűnik tehát, hogy a Griffith-elmélet megmagyarázza a szilárd anyagok relatív gyengeségét. Részletesebb megfontolások azonban számos problémát vetnek fel. A mikroropedések, vagy üregek létezésének feltételezésével nem magyarázhatók meg a rideg töréssel kapcsolatos általános megfigyelések, továbbá nyitott kérdés marad az üregek keletkezése. Az eddigiek alapján nem megválaszolható kérdések érzékeléséhez célszerű röviden áttekintenünk a rideg és szívós törés sajátosságait.

3. A KRISTÁLYOS TESTEK TÖRÉSI MÓDJAI

3.1. Rideg törés

Sok kristály rideg törése olyan krisztallográfiai síkok menti hasadással történik, amelyekhez alacsony kötési (felületi) energia tartozik. Erre példa a csillám jól ismert hasadása. Ez a tulajdonság egyértelműen a csillám erős anizotrópiájával kapcsolatos. Világos, hogy összetett feszültségállapot hatására minden más alakváltozást megelőzve, általában ezen gyengén kötött síkok felhasadása következik be. Az erős anizotrópia azonban nem egy általános kritérium a rideg hasadásra. A rideg törés ugyanis általános esetben igen sok paramétertől függ. Pl. a tércentrált köbös kristályok (fémek) is többnyire az (100) síkok mentén, rideg hasadással törnek 100 K alatti hőmérsékleteken, annak ellenére, hogy ez a sík nem alacsony kötési energiájú és a képlékeny anizotrópia is kicsi.

A rideg hasadáshoz tartozó feszültség általában lényegesen kisebb a (2) alatti ideális szakító szilárdságnál, pl. vasra $\sigma_{sz}/40$ körüli érték. A hasadási törés a Griffith elmélettel, tehát létező repedések alapján nem magyarázható. Egyrészt a hasadási repedés növekedése a (4) alattinál kisebb feszültségeknél bekövetkezik, másrészt egyszerű (pl. felületen centrált köbös) kristályok esetén nem is várhatjuk, hogy pl. egy bemetszés csúcánál repedés képződjön, mert ehelyett nagy valószínűséggel csúszások, vagy ikerképződések lépnek fel.

A hasadási repedések kialakulása szoros kapcsolatot mutat a képlékeny alakváltozással. Pl. polikristályos vas esetén már régen ismeretesek a következő kísérleti tapasztalatok:

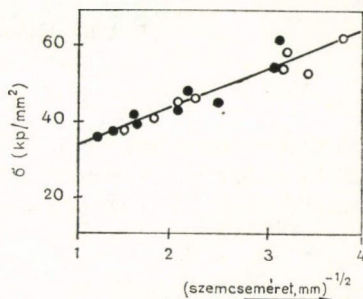
1. 100 K alatti hőmérsékleteken történő alakításkor a képlékeny alakítást már szenvedett tartományokban kicsiny hasadási repedések figyelhetők meg, míg más tartományokban nem [9].

2. Ha a folyáshatár egyéb behatások eredményeként (pl. besugárzás miatt) növekszik, akkor a rideg töréshez tartozó feszültség is közel azonos mértékben megnő [10].

3. A rideg töréshez (pl. nyújtáskor) tartozó feszültség gyakran összeesik egy más képlékeny alakváltozási módhoz (pl. összenyomáshoz) tartozó folyáshatárral. A 2. ábra mutat erre egy példát [11]. A két feszültség szemcsemérettől való azonos függése arra utal, hogy a szemcse méret hasonló szerepet játszik mint a Griffith elméletben a repedés hossza.

Sokszor előfordul az is, hogy a rideg törés már a folyáshatárnál kisebb feszültségek esetén is bekövetkezik [13]. Bizonyos esetekben ez nem hasadások kialakulásának, hanem kiválásokkal gyengített szemcsehatárok menti törésnek tulajdonítható [14]. Amennyiben azonban a törés hasadással megy végbe, akkor a hasadások környezetében mindig lokális megfolyások is megfigyelhetők [15].

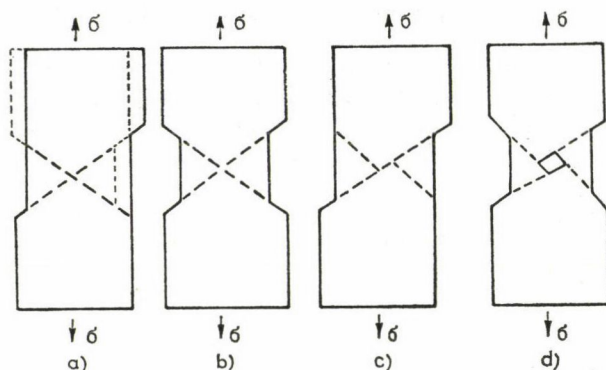
Mindezek a jelenségek egyértelműen arra utalnak, hogy a rideg törés folyamata szorosan összekapcsolódik képlékeny alakváltozási mechanizmusokkal.



2. ábra. Lágy acél nyújtási szakítószilárdsága (●) és összenyomási folyáshatára (○)

3.2. Szívós (képlékeny) törés

A szívós törés jellemzője, hogy előtte az anyag jelentős képlékeny alakváltozást szenved. A szívós törést megelőző képlékeny alakváltozási folyamatok során a kristály egyes tartományaiban igen nagy mértékű elcsúszások alakulnak ki, amelynek eredményeként a minta egyes keresztmetszetein beszűkülések keletkeznek. Erre a mechanizmusra mutat egy idealizált példát a 3. ábra. A minta befűződése többnyire nagy számú üreg keletkezésének (3d. ábra) a következménye. Az üregek tágulásuk során egyesülnek, s ezáltal a nyújtáskor létrejövő szakadási felület végül jellegzetes szálas szerkezetet mutat (4. ábra). Az üregek kialakulása általában idegen fázisok (kiválások) környezetében jön létre.



3. ábra. Szívós törést megelőző üregképződés lehetséges módja

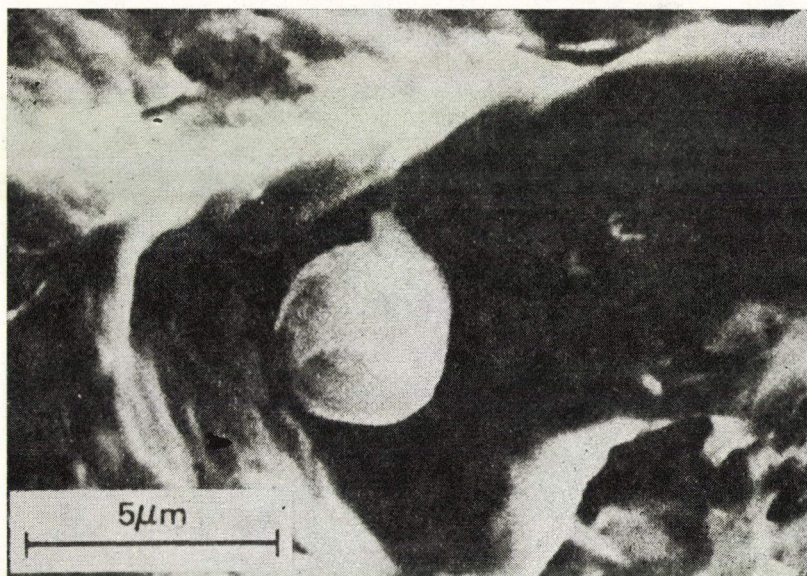
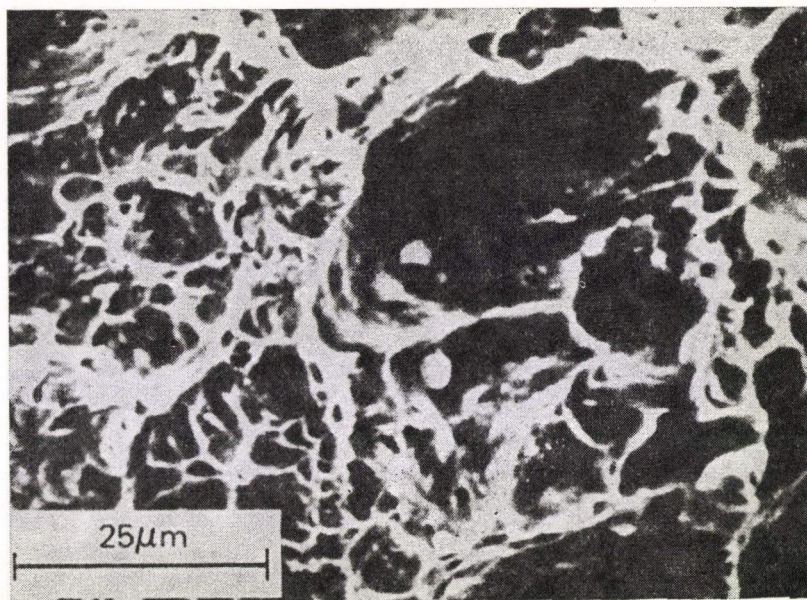
A szívós anyagok szakítószilárdságában jelentős szerepe van az alakítási keménységnek, és a deformáció során a csúszósíkokban keletkező hőnek, amely lokális lágyulást eredményez. A szívós törés nem hozható kapcsolatba a Griffith feszültséggel, mert a külső feszültség képlékeny alakváltozásra fordítódó munkája lényegesen nagyobb az üregek felületi energiájánál.

3.3. A képlékeny és rideg anyagok összehasonlítása

Az előzők alapján a szilárd anyagok törését tisztán mechanikai szempontból úgy foghatjuk fel, mint egy olyan kritikus állapot változást, amely az anyag rugalmas-képlékeny tulajdonságaiban következik be. A törés feltételét ennek alapján általában két formában szokás megadni. Az első esetben azt írjuk elő, hogy az alkalmazott σ feszültség elérje a maximális kohéziós erőktől származó σ_0 feszültséget, azaz

$$\sigma \cong \sigma_0. \quad (5)$$

A második esetben a test rugalmas energiájára írunk elő feltételt. Mivel a törés mindig mikrorepedések vagy üregek kialakulása után következik be, a törés energetikai feltétele az, hogy az üregek valamilyen jellemző L méretének növekedésekor



4. ábra. Acél próbatest szívós törési felülete (pásztázó elektronmikroszkópos felvétel)

a test w rugalmas energiája csökkenjen, azaz

$$\frac{\partial w}{\partial L} < 0, \text{ ha } \sigma > \sigma'_0,$$

ahol σ'_0 az a feszültség, amelynél $\partial w / \partial L = 0$.

A (4) alatti Griffith-feszültség ebből az energia feltételből származik. Ugyanis, ha egy L méretű üreg keletkezik az anyagban, akkor a rugalmas energia csökkenése $\sigma^2 L^3 / 2E$ -vel arányos ($\sigma^2 / 2E$ a rugalmas energia sűrűsége). Ugyanakkor a felületi energia γL^2 -tel arányosan nő meg, amelyek egyenlőségéből

$$\sigma^2 \sim \frac{\gamma E}{L},$$

megegyezésben (4)-gyel.

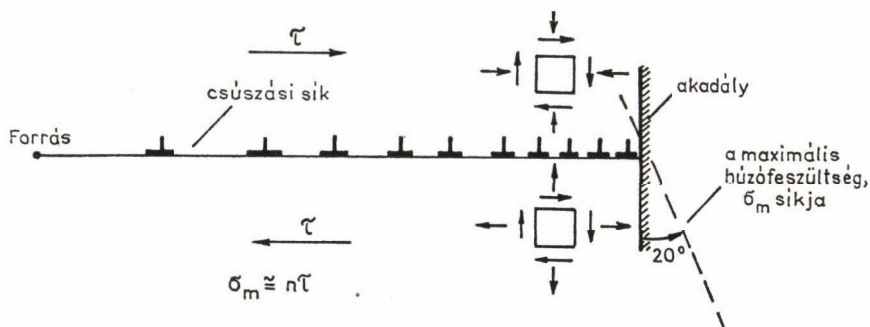
Az előzőkön túlmenően a különböző anyagok törési tulajdonságait jellemezhetjük a külső feszültségnek az egységnyi törési felületre eső teljes plasztikus munkájával, w_p -vel [16]. Ha egy testet tökéletesen ridegnek tételezünk fel, akkor ennek töréséhez csak a repedés felületi energiáját kell befektetnünk, tehát ekkor $w_p = 2\gamma$. Ha a törés tiszta képlékeny nyírás során bekövetkező befűződéssel áll elő, akkor w_p sokkal nagyobb mint a γ és elérheti a $10^5 \gamma$ értéket is [17].

A w_p munkával tehát az anyag ridegsége (vagy képlékenysége) jellemezhető. Világos azonban, hogy a rideg és képlékeny esetek nem választhatók szét élesen. Bármely kristály, amelyben hasadások jöhetnek létre rideg lesz, legalábbis alacsony hőmérsékleten. Ugyanez az anyag képlékeny lehet akkor, ha hasadások nem jöhetnek benne létre, vagy ezek terjedése valamilyen ok miatt akadályozva van.

A következőkben megvizsgáljuk azokat a képlékeny alakváltozási folyamatokat, amelyek repedések (hasadások) keletkezéséhez vezetnek.

4. REPEDÉSEK KELETKEZÉSÉRE VEZETŐ DISZLOKÁCIÓS MECHANIZMUSOK

Ha az A, B végpontokban rögzített diszlokációs szakasz csúszósíkjában elegendően nagy csúsztatófeszültség működik, akkor a diszlokáció fokozatos kihajlása egy diszlokáció hurok képződését eredményezi, majd a folyamat újból előlről kezdődik. Az ilyen (Frank—Read) forrásról leszakadó diszlokációhurkok folyamatosan távol-

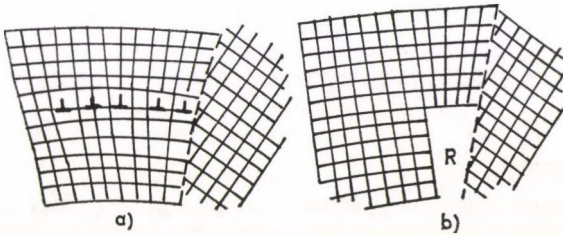


5. ábra. Akadály előtt feltorlódott diszlokációhalmaz

nak mindaddig, amíg valamilyen akadály (szemcsehatár, kiválás, stb.) megállítja őket. Ekkor az akadály és a forrás között egy feltorlódott diszlokáció halmaz alakul ki (5. ábra), amely a forrás működését leállítja. A feltorlódott diszlokáció halmazok lényeges szerepet játszanak repedések kialakulásában.

4.1. Repedés keletkezése szemcsehatár mentén

Tegyük fel, hogy a feltorlódott diszlokáció halmaz egy szemcsehatárnál keletkezik (6a. ábra). Akkor a szemcsehatárnál az 5. ábrán jelzett, közelítőleg $\sigma_m \cong n\tau$ értékű húzófeszültség hatására a szemcsehatár felhasadhat. Érezhető ugyanis, hogy ha az első két diszlokáció a húzófeszültség hatására „egyesül” és ezáltal egy kicsiny üreg keletkezik, akkor a többi diszlokáció ebbe az üregbe lavinaszerűen belefut, kialakítva végül egy mikroszkopikus méretű üreget (6b. ábra).



6. ábra. Repedésképződés feltorlódott diszlokációhalmazból szemcsehatár mentén

A folyamat létrejöttéhez szükséges diszlokációk számát a következőképpen becsülhetjük meg. A repedés kialakulásának (a szemcsehatár felszakadásának) a feltétele az, hogy σ_m elérje a (2) alatti elméleti szakítószilárdságot, azaz

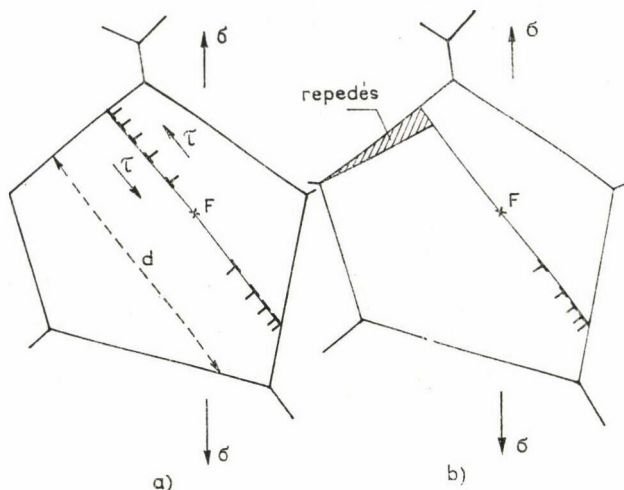
$$\sigma_m = \sigma_{sz}^c \cong 0,1E = n\tau. \quad (6)$$

Ha $\tau = 10^{-3}E - 10^{-4}E$, akkor $n \cong 100 - 1000$, amik reális értékek.

Az ilyen repedések keletkezésekor az anyag minőségétől és állapotától függően, egyaránt lehet szívós vagy rideg. Ha ugyanis az egyes csúszási rendszerekben egyidejűleg sok csúszási síkban indulhat meg a források működése, akkor adott mértékű alakítás során egy-egy forrás csak viszonylag kis számú diszlokációt bocsát ki. Ezért a repedések csak viszonylag nagy alakítások után jönnek létre. Ha azonban a sokszorozódás csak egyes kitüntetett csúszási síkokban következhet be, akkor a repedés keletkezéséhez szükséges n diszlokációs szám már a folyáshatárnál létrejöhet és a törés rideg lesz.

A töréshez szükséges σ külső feszültség megbecsléséhez figyelembe kell vennünk a szemcseméret hatását is. A forrásból két oldalra kibocsátott feltorlódott halmaz (7. ábra) teljes hossza az átlagos d szemcsemérettel közelíthető. Egy ilyen halmaz egyensúlyban tartásához szükséges τ nyírófeszültség függ a szemcsemérettől is [18]:

$$\tau = \frac{\mu b n}{\pi(1-\nu)d}, \quad (7)$$



7. ábra. A szemcseméret hatása a repedésképződésre.
A repedés az egyik oldalon képződik, ahol a $m\tau$ eléri az σ_{sz}^c értékét

ahol b a diszlokációk Burgers vektorának abszolútértéke és ν a Poisson-szám. Felhasználva, hogy a Taylor formula szerint $\sigma = m\tau$, ahol $m \cong 3$, a (6) összefüggésből n -et (7)-be helyettesítve a következő kifejezésre jutunk:

$$\sigma = \sigma_0 + Kd^{-1/2}. \quad (8)$$

Itt K a (6) és (7) összefüggésben szereplő állandókat tartalmazza és σ_0 -al a diszlokációk mozgását akadályozó sűrűlőds jelleget határozza meg.

4.2. Repedés keletkezése szemcsék (egykristályok) belsejében

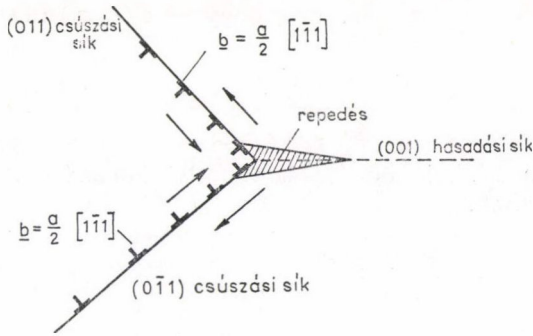
Repedések keletkezhetnek diszlokáció mozgások következményeként szemcsék belsejében (8. ábra), vagy egykristályban is [19, 20]. A részletes tárgyalás helyett három példát mutatunk be.

Egymást metsző, erősen aktivált csúszási síkok találkozási helyén keletkezhet repedés. Ez megvalósulhat pl. tércentrált köbös fémek esetén a 8. ábrán vázolt módon. A (001) sík mentén találkozó éldiszlokációkból az

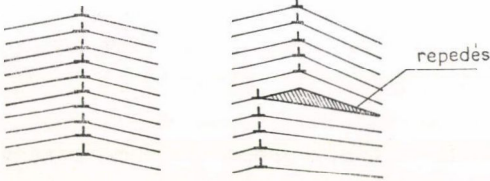
$$\frac{a}{2} [1\bar{1}1] + \frac{a}{2} [\bar{1}11] = a[001]$$

reakció eredményeként a (001) síkban fekvő éldiszlokációk keletkeznek. Ezek elmozdulása repedés kialakulását eredményezi. Ilyen diszlokációkat elektronmikroszkóppal is megfigyeltek [21].

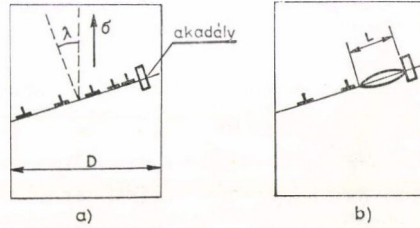
Egy másik lehetséges repedésképző folyamat kisszőgű szemcsehatárt képező éldiszlokációfal két részének egymáshoz képesti elmozdulása. Ez a 9. ábra szerinti repedést eredményez.



8. ábra. Szemcsén belüli repedés keletkezése
tércentrált köbös fémekben



9. ábra. Repedés keletkezése éldiszlókációfal
részleges elmozdulása során



10. ábra. Feltorlódott diszlókációk (a)
és repedésképződés (b) egykristályban

Repedés jöhet létre egykristályok erősen aktivált csúszósíkjai mentén is, ha a kérdéses sík akadályt tartalmaz. Ezt az esetet egy kissé részletesebben megvizsgáljuk [22].

Tekintsük a 10a. ábrán mutatott akadály előtt feltorlódott diszlókációhalmazt. Ha ennek következményeként a 10b. ábrán látható repedés keletkezik, akkor a kristály $U - U_0$ energiaváltozása a következő kifejezéssel adható meg:

$$U - U_0 = 2\gamma L - \frac{\pi v \sigma_n^2}{8\mu} L^2 - \frac{\mu (Nb)^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{L}{r_0}, \quad (9)$$

ahol az első tag a repedés felületi energiája, a második tag az üreg keletkezése révén felszabaduló rugalmas energia (σ_n az üreg felületére merőleges húzófeszültség) [8], míg a harmadik tag a repedésben eltűnő N diszlókáció energiája (ez utóbbi úgy számítható, mint egy L hosszúságú, Nb Burgers vektorú diszlókáció energiája).

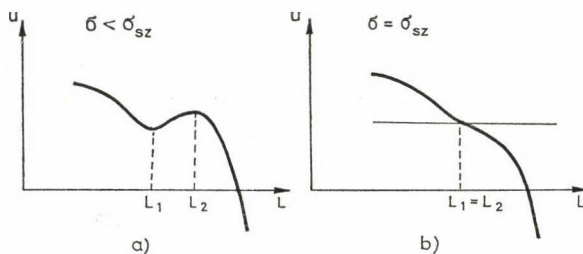
A repedés keletkezése akkor valósulhat meg, ha ennek során a kristály energiája nem növekszik, vagyis ha $U - U_0 \leq 0$.

Tegyük most fel, hogy keletkezik repedés, akkor ennek stabilitása szabja meg azt, hogy a repedés törést eredményez-e, vagy sem. A stabilitási viszonyokat a (9) alatti $U(L, \sigma_n)$ függvény tulajdonságai szabják meg. A matematikai számításokat itt

nem részletezzük, csak rámutatunk arra, hogy az $U(L, \sigma_n)$ függvény szélsőértékét meghatározó

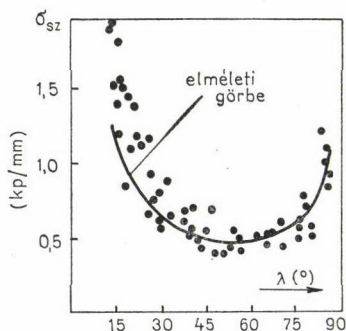
$$\frac{\partial U}{\partial L} = 0 \quad (10)$$

egyenletnek általában két különböző gyöke van. Ilyenkor az $U(L)$ függvény sematikus képe a 11a. ábra szerinti.



11. ábra. Stabil (a) és instabil (b) repedést tartalmazó kristály energiája

Az ennek megfelelő külső terheléseknél L_1 hosszúságú repedés keletkezik, amely egyensúlyban van, azaz nem növekedhet. A kritikus terhelés, vagyis a szakítószilárdság annak az esetnek felel meg, amikor a (10) egyenlet két gyöke összeesik (11b. ábra). Ekkor az energia a repedés hosszával monoton csökken, azaz a repedés a kialakulása után folytonosan nő és így bekövetkezik a törés. A gondolatmenetet számítással végigkövetve meghatározhatjuk a szakítószilárdságot mint a külső terhelés és a csúszási sík relatív orientációjának függvényét. A kapott eredmény jó egyezést adott Zn egykristályon alacsony hőmérsékleten mért adatokkal [22] (12. ábra).



12. ábra. Zn egykristály szakítószilárdságának orientáció függése (a pontok mért adatokat jeleznek)

5. ÖSSZEFOGLALÁS

A dolgozatban a szilárdtestek törésével kapcsolatos mikroszkopikus folyamatokról adtunk rövid áttekintést. Összefoglaltuk a kristályos szerkezetű anyagok szívós és rideg törésének jellemző sajátosságait. Megmutattuk, hogy a képlékeny alakváltozás során fellépő diszlokáció mozgások repedések keletkezéséhez vezetnek. Energetikai megfontolások alapján elemeztük az így kialakuló repedések stabilitását. Az elméleti eredmények helyességét Zn egykristályon mért adatok felhasználásával szemléltettük.

IRODALOM

1. J. K. Mackenzie, Thesis, Bristol, 1949.
2. G. I. Taylor, Proc. Roy. Soc. A145, 362, 1934.
3. E. Orowan, Z. Phys. 84, 634, 1934.
4. M. Polányi, Z. Phys. 84, 660, 1934.
5. I. Kovács and L. Zsoldos, Dislocations and Plastic Deformation, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1973.
6. A. Kelly, Strong Solids, Clarendon Press, Oxford, 1966.
7. A. H. Cottrell, Proc. Roy. Soc. A276, 1, 1963.
8. A. A. Griffith, Phil. Trans. A221, 163, 1920.
9. G. T. Hahn, B. L. Averbach, W. S. Owen and M. Cohen, Swamscott Conf. on Fracture, ed. B. V. Averbach et al., Wiley, New York, 1959. p. 91.
10. W. Owen, ibid, p. 141.
11. J. R. Low, Deformation and Flow of Solids, ed. R. Grammel, Springer-Verlag, Berlin, 1956. p. 60.
12. N. J. Petch, J. Iron Steel Inst. 173, 25, 1953.
13. N. P. Allen, Swamscott Conf. on Fracture, ed. B. V. Averbach et al., Wiley, New York, 1959. p. 123.
14. D. McLean, Mechanical Properties of Metals, Wiley, New York, 1962.
15. J. F. Knott and A. H. Cottrell, J. Iron Steel Inst. 201, 249, 1963.
16. A. Kelly, W. R. Tyson and A. H. Cottrell, Phil. Mag. 567, 1967.
17. G. R. Irwin, J. A. Kies and H. L. Smith, Proc. Am. Soc. Test. Mater., 58, 640, 1958.
18. Ugyanaz mint [5], p. 155.
19. J. Friedel, Dislocations, Pergamon Press, London, 1964.
20. A. H. Cottrell, The Physics of Metals, 2. Defects, ed. P. B. Hirsch, Cambridge University Press, Cambridge, 1975. p. 247.
21. W. Carrington, K. F. Hale and D. McLean, Proc. Roy. Soc. A259, 203, 1960.
22. B. Wielke and F. Stangler, Phil. Mag. 22, 155, 1970.

13. FÁRADÁSOS TÖRÉS

HONYEK GYULA

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOM

1. Bevezetés	563
2. A fáradásos törés kialakulásának lépései	564
3. A mikrorepedések megjelenése	565
4. A mikrorepedések terjedése és egybeesése	569
5. A makrorepedések növekedése	570
5.1. A makrorepedések küszöb vagy küszöbhez közeli növekedése	571
5.2. A fáradt repedés terjedési sebességének a Paris-összefüggéssel leírható tartománya	572
6. Összefoglalás	577
7. Irodalom	577

1. BEVEZETÉS

A fémek fáradásos törésének vizsgálata, illetve a kifáradással szembeni ellenállóképesség kialakításának a kutatása immár 140 éves történetre tekinthet vissza. Mióta Rankine 1843-ban megjelent munkájában [1] elsőnek írta le a fáradt törés létezését és természetét, sőt a fáradásos törés elkerülésére elsőként javasolta a vasúti kocsik tengelyének kialakításakor az éles törések, hirtelen keresztmetszet változások elkerülését, a témáról dolgozatok ezrei láttak napvilágot. Az első fárasztással foglalkozó laboratóriumot Wöhler alapította, ahol 1858-ban dolgozta ki a fárasztásos vizsgálatok jelenleg is legfontosabb módszerét [2], a róla elnevezett Wöhler-diagramok felvételét. A fárasztási vizsgálatok kiértékelésének módszereivel és a fáradást befolyásoló tényezőkkel részletesen foglalkozik a [3] dolgozat, ezért ezt a továbbiakban nem részletezzük, hanem figyelmünket inkább a fáradásos törésig lejártszódó folyamatok mikroszerkezeti vonatkozásaira összpontosítjuk.

A fárasztás vizsgálatának hosszú története, az ezalatt megjelent munkák nagy száma ellenére a téma még sem kísérletileg, sem elméletileg nem lezárt. A jelenlegi kutatások célja a fáradással szemben jobban ellenálló ötvözetek kialakítása, amelyekből több előre látással olyan szerkezetek tervezhetők, amelyek kevesebb töréssel viselik el a fárasztásos igénybevételt, miközben a szerkezetek előállítási költsége, illetve a felhasznált anyagok mennyisége csökken. Ez a kutatás és fejlesztés minden bizonnyal még sok munkát fog adni az ezzel foglalkozó kohászok és fémfizikusok számára.

2. A FÁRADÁSOS TÖRÉS KIALAKULÁSÁNAK LÉPÉSEI

A jelen dolgozat célja annak leírása és értelmezése, hogyan alakul ki a fáradásos törés. A dolgozatban főleg *Fine* egy nemrégiben megjelent összefoglaló munkájára [4] támaszkodunk, amely az 1979-ben a „Campbell Memorial Lecture” sorozat keretében megtartott előadását tartalmazza. Megfelelő ciklikus terhelés hatására egy kezdetben repedésmentes fémbe mikrorepedések alakulnak ki, amelyek vagy összekapcsolódással, vagy növekedés útján makrorepedésekké fejlődhetnek. A makrorepedések növekedése a törési határig tart, majd a végső törés következik be. Szokásos terhelések alkalmazásakor a fáradásos repedés szingularitásokon, vagy azokhoz közel alakul ki, amelyek általában a felületen, vagy közel a felület alatt fekszenek. Ilyen szingularitásokat képezhetnek a felületi bemaródások, karcok, árkok, bemélyedések, a keresztmetszet éles változásai, törékennyé vált szemcsehatárok, stb. A mikrorepedések a kiindulási anyagban is jelen lehetnek, ezek az öntés, a hőkezelés, vagy a mechanikai alakítás során kerülhetnek a fémbe. Ha a ciklikusan váltakozó feszültség amplitúdója elegendően nagy, plasztikus deformáció, azaz hosszútávú diszlokációmozgás történik, amely csúszási lépcsők kialakulásához vezet a felületen. Ezek a további ciklikus alakítás hatására addig növekedhetnek, amíg elegendően rideggé válnak ahhoz, hogy helyükön egy, vagy több fáradásos repedés kezdjen kialakulni. Másrészről a diszlokációk feltorlódhatnak valamilyen akadály előtt (ami például egy bemélyedés vagy egy szemcsehatár, stb. lehet), majd az akadályt áttörve lavinaszerű mozgással kialakíthatnak egy csúszási sávot, elrepeszthetnek egy részecskét, vagy megszüntethetik a részecske és a mátrix, illetve a szemcsehatármenti kohéziót.

A kezdeti repedések nagyon kicsinyek. Méretük nem ismert eléggé, mivel bonyolult meghatározni, hogy egy csúszási sávból, vagy más módon mikor alakul ki repedés, de az bizonyos, hogy amint a repedések néhány mikron nagyságúak lesznek, azokat normál optikai metallográfiával észlelni lehet. Ezeket a kezdeti alakzatokat nevezzük mikrorepedéseknek. Ezután a mikrorepedések növekedni kezdenek, vagy összekapcsolódással alakítanak ki egy vagy több makrorepedést, amelyek a törési határig növekszenek.

A fáradásos törési folyamat a következő szakaszokra osztható:

1. Ciklikus képlékeny deformáció a fáradásos repedések megjelenését megelőzően.
2. Egy vagy több mikrorepedés kialakulása.
3. A mikrorepedések terjedése vagy összekapcsolódása, ami egy vagy több makrorepedés kialakulásához vezet.
4. Egy vagy több makrorepedés továbbnövekedése.
5. A végső törés.

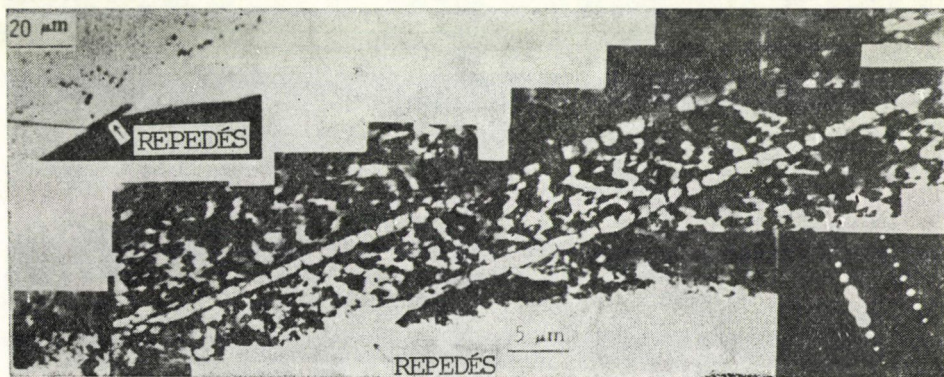
Az 1. szakaszban lejártszódó folyamatokkal most nem foglalkozunk, mivel azokat a jelen cikksorozat „Egykristályok ciklikus alakváltozása” című fejezetében részletesen tárgyaltuk. Ugyancsak nem foglalkozunk az 5. szakaszban lezajló folyamatokkal, mert a fáradásos törés végső szakaszában a repedések terjedési sebessége már olyan nagy, hogy a közben lejártszódó deformációs folyamatokat az egyirányú nyújtáskor megismert törési mechanika írja le. Ennek széleskörű irodalmából most csak két magyar nyelvű dolgozatra hívjuk fel a figyelmet [5, 44]. A környezeti hatásokkal, amelyek egyébként különösen jelentősek, ebben a dolgozatban csak kismértékben foglalkozunk, az ismertetendő vizsgálatokban a környezet általában szobahőmérsékletű levegő vagy olyan semleges gáz volt, mint például a száraz argon.

A fáradásos repedés terjedésének szakaszait más módon osztotta fel *Forsyth* [6], aki I. és II. szakaszt különböztetett meg. Ez a felosztás azóta nagyon általánosan elterjedt az irodalomban. A felosztás alapja az a felismerés, hogy a ciklikus deformáció kezdeti szakaszán, amikor az alkalmazott feszültségek még nem túl nagyok, illetve a repedés terjedési sebessége még elegendően kicsi, a repedések a kristálytani csúszósíkban a helyi feszültség irányába terjednek. Az ilyen irányú repedés növekedést nevezzük I. szakaszú repedés terjedésnek, míg a II. szakaszban a repedés terjedésének iránya merőleges az alkalmazott feszültség irányára. A II. szakaszt általánosságban a nagy repedés terjedési sebesség, a jelentős helyi deformációs lokalizáltság, az alkalmazott feszültségek magas értékei jellemzik. A továbbiakban utalni fogunk a két-féle felosztás közti kapcsolatokra.

3. A MIKROREPEDÉSEK MEGJELENÉSE

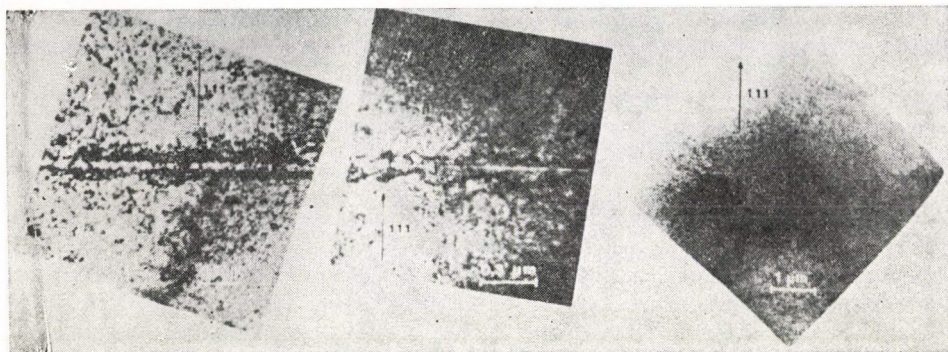
A fáradásos repedések megjelenését csúszási sávok mentén, szemcsehatárokból, második fázisú részecskékből, továbbá idegen fázisú zárványok határfelületén észlelhetjük [4]. A repedés kialakulásának módja attól függ, hogy milyen módon képződhet legkönnyebben. Ha például gyenge, rideg kiválások vannak jelen, akkor ezek játszanak domináns szerepet. Mivel a csúszás a szemcsehatárokból mentén nem-folytonos, így több, minden szemcsében legalább öt csúszási rendszernek kell aktiválódnia [7] ahhoz, hogy a szemcsék ne távolodjanak el egymástól, ezért a szemcsehatárok különösen jelentősek a fáradásos repedések kialakulásában.

A felületcentrált köbös (fck) fémek egykristályaiban ciklikus terhelések hatására állandósult csúszási sávok alakulnak ki [8], amelyek a további ciklikus alakítások hatására kialakuló mikrorepedések nukleációs helyeül szolgálnak [9–12]. A jelenség azzal kapcsolatos, hogy az állandósult csúszási sávok a felületre érve felületi barázdáltságot hoznak létre [8], ami bemetszésként hatva nagy helyi feszültség koncentrációt eredményez a felületen a csúszási sávok helyén, így könnyítve meg a fáradásos mikrorepedések nukleációját. *Katagiri* és *munkatársainak* [13] az 1. ábrán látható TEM felvételei alapján meggyőző képet alkothatunk arról, hogy a fáradásos



1. ábra. Repedéskeletkezés a felületen, az állandósult csúszási sávok létraszerkezte mentén, fárasztott réz mintában. A bal felső sarokban lévő, optikai mikroszkóppal készült felvétel a repedés alakját mutatja a minta felületéhez képest

mikrorepedés valóban az állandósult csúszási sáv mentén jelenik meg a vizsgált fárasztott réz mintában. Általánosságban érvényes, hogy amikor a repedések az állandósult csúszási sávok mentén jelennek meg, akkor a későbbi repedésterjedés I. szakaszú [14], mivel a csúszási sávok is az alkalmazott nyírófeszültségek irányában alakulnak ki. *Vogel* [15], illetve *Vogel és munkatársai* [16] csúcscsúzárdúságra öregített Al—Zn—Mg egykristályok vizsgálatából megállapították (2. ábra), hogy a kiválásmentes „állandósult csúszási sávok” megelőzik az I. szakasz szerint terjedő repedéseket. Valószínűnek látszik, hogy a repedés előtt haladó csúszási sávban a kiválások mintegy mechanikusan oldódnak, így azok kiválás-mentessé válnak.



2. ábra. „Állandósult csúszási sáv” az I. szakaszú repedés csúcsától balról jobbra haladva 60, 125 és 150 μm -re fárasztott Al—Zn—Mg kristályban

Polikristályos fémekben jól megfigyelhető, hogy a szemcsehatárok megakadályozzák az állandósult csúszási sávok és a csúszási sáv-repedések továbbterjedését egyik szemcséből a másikba. *Figueroa és Laird* polikristályos rézen végzett méréseik alapján megállapították [14], hogy a fárasztásos károsodás vagy új állandósult csúszási sávok kialakulásával terjedhet tovább a szomszédos szemcsékben, és/vagy a ciklikus deformáció lokalizálódhat a szemcsehatáron. A fáradt repedés a szemcsehatárokon általában magasabb amplitúdók esetén jelenik meg, amit *Kim és Laird* vizsgált részletesen [17]. Interferometriás vizsgálataikkal megmutatták, hogy a ciklikus csúszás fokozatosan felületi lépcsőket épít ki, amelyek a „sebezhető” felületen mikrorepedésekre vezetnek. A tércentrált köbös (tck) fémekben az előzőekben leírt mechanizmuson kívül egy másfajta szemcsehatárközi repedés képződés is jelentős. A tck fémek egykristályaiban a húzás-nyomás hatására a csavardiszlokációk asszimmetrikus csúszómozgást végeznek, ami erős alakváltozást eredményez a fárasztás alatt [14]. Fárasztott polikristályos α -vas mintákon *Mughrabi* megmutatta [18, 19], hogy a felülethez közeli szemcsék hasonló alakváltozásokat szenvednek, ami a szemcsestruktúra periodicitásának megfelelő felületi durvuláshoz vezet, és így repedések keletkezését indítja meg a szemcsehatárok mentén.

Kiválasosan keményedő ötvözetek szemcsehatármenti kiválás-mentes zónáiban egy másfajta szemcsehatárközi repedés keletkezési és terjedési mechanizmus indulhat meg [20], ami a puha kiválás-mentes zónákban történő deformáció lokalizáltsággal magyarázható. *Starke és Lütjering* megállapította [21], hogy a kiválás-mentes zónákban a deformáció lokalizáltsága csökkenthető a szemcseméret csökkentésével,

a szemcsehatárba hideg alakítás útján lépcsők kialakításával, illetve a szemcsehatároknak a feszültségteneggellyel párhuzamos vagy arra merőleges felsorakoztatásával.

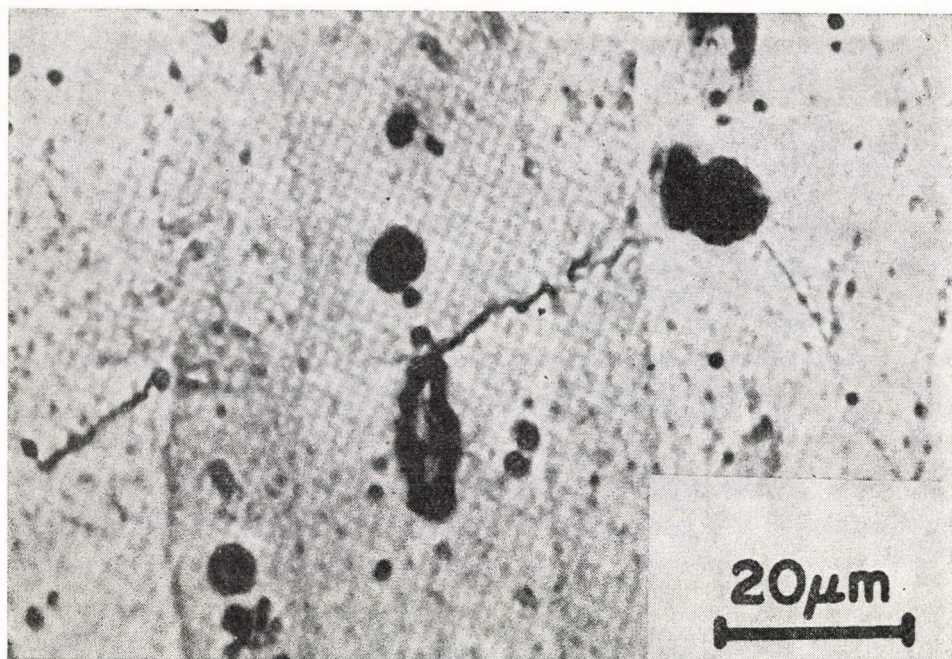
Fine véleménye szerint általánosságban a fárasztásos repedések kialakulásakor az események sorrendje a következő [4]. A ciklikus képlékeny deformáció közben a diszlokációk vagy elérik a fém felületét, vagy feltorlódnak akadályok előtt. Ha a diszlokációk nem torlódnak fel, hanem folyamatosan elérik a felületet, akkor belőlük csúszási sávok, majd repedések alakulnak ki, amelyek a szemcsék belsejében jelennek meg, mivel ott a folyási feszültség alacsonyabb. A tapasztalatok szerint a csúszási sávok kialakulásával szembeni ellenállás a szemcse méret növekedtével lecsökken, követve a Hall—Petch relációt [22].

Az akadályok sokféle típusa okozhat a ciklikus terhelés alatt felhalmozódó diszlokáció feltorlódást, így szemcsehatárok, zárványok, oxid rétegek jöhetnek számításba. Amikor a diszlokáció feltorlódás elér egy kritikus értéket, diszlokációs lavina folyamat játszódik le, amely csúszási sávbeli repedésre vezethet a mátrixban, vagy megszüntetheti a kohéziót egy szemcsehatár mentén, illetve egy második fázis-mátrix határfelületen, továbbá képlékeny alakváltozás jöhet létre a szemcsehatárban, vagy lehetséges, hogy egy, a mátrixban vagy a szemcsehatárban fekvő második fázisú részecske megreped. Ha a szemcsehatármenti tartományok egy kiválásosan keményedő ötvözetben nem tartalmaznak kiválásokat, akkor, mint már említettük, a képlékeny alakváltozás alacsony plasztikus feszültségek mellett ezekbe a tartományokba koncentrálódik, és itt alakulnak ki a repedések. Abban az esetben, ha egy különálló második fázisú részecske el is reped, még nem feltétlenül alakul ki fáradt repedés, mert ahhoz a repedésnek a mátrixba be kell hatolnia. Így nem minden megrepedt zárványból alakul ki fáradt repedés. A fárasztási vizsgálatokban a repedések mindezen típusai megfigyelhetők. Zárványokból eredő csúszási sávbeli repedéseket láthatunk a 3. ábrán, amelyeket 2024—T4 jelű, $\text{Al}_7\text{Cu}_3\text{Fe}$ zárványokat tartalmazó alumínium ötvözetben figyelték meg [22]. A repedések nagyon hirtelen jelentek meg.

A fáradt repedés keletkezésében a zárványok, mint nemrég említettük, szerepet játszhatnak úgy, hogy először a zárvány reped meg, majd a repedés továbbterjed a mátrixba. Amint *Morris* és *munkatársai* megmutatták [23], ez az eset valósul meg a 2219—T851 jelű alumínium ötvözet esetén. *Chang*, *Morris* és *Buck* modellezték ezt a folyamatot [24], és megállapították, hogy nagy részecskék esetén a fáradt repedés mátrixba hatolása a sebesség-kontrolláló folyamat és nem a diszlokáció feltorlódás okozta részecske törés.

Eid és *Thomason* megmutatta [25], hogy egy edzett és hőkezelt közepes karbon tartalmú Mo-nel ötvözött acélban, amely $25\ \mu\text{m}$ átmérőjű Al_2O_3 zárványokat tartalmazott, a részecskék és a mátrix közötti kötések megszűnése ugyanúgy lejátszódott, mint a részecskék megrepedése, így mindkét módon keletkeztek fáradt repedések. Feszültségtér analízisük alapján hangsúlyozták a részecskék és a mátrix közti Young-modulusz arány fontosságát. Ha ez az arány 1-nél nagyobb, mint például az Al_2O_3 zárványok esetén vasban, akkor nagy feszültségek koncentrálódnak a részecskék végpontjain. Sem a MnS zárványok, sem a Fe_3C részecskék, amelyek modulusza nem nagyobb a vasénál, nem voltak a fáradt repedések forrásai ugyanebben az ötvözetben.

Egy nagyszilárdságú alumínium ötvözetben, amelyhez meleg alakítással, nagy nyomáson Al_2O_3 részecskékből álló poradalékot adtak, amelynek Young-modulusza hozzávetőlegesen tízszerese a mátrixnak, az Al_2O_3 részecskék játsszák a fő szerepet a szemcsehatárokon észlelt fáradt repedések kialakulásában [4].



3. ábra. Csúszási sávbeli repedés metallográfiai felvétele $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ zárványokat tartalmazó 2024—T4 jelű alumínium ötvözetben 12,000 ciklus után. A névleges feszültség 84 MN/m^2 a feszültség koncentrációs faktor 2,6 volt

A zárványok lényeges szerepet játszanak a 2024—T4 jelű ötvözet fáradt repedéseinek a kialakulásában. *Kung és Fine* megállapították [22], hogy annak valószínűsége, hogy egy Al_2CuMg vagy $\text{Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ összetételű részecske kialakít egy csúszó-sávbeli repedést, erősen lecsökken, amint a részecske mérete $7 \mu\text{m}$ alá csökken.

Annak jelentősége, hogy egy anyagban ciklikus keményedés vagy lágyulás történik-e, valószínűleg kisebb a fáradási határra, mivel a képlékeny deformációs amplitúdó csak eléggé kis mértékben befolyásolja a fáradási határt [4]. A ciklikus terhelés hatására bekövetkező felületi zavar nagysága, vagy a diszlokáció feltorlódás mérete abban a lokalizált tartományban függ a képlékeny deformációs amplitúdótól, ahol a fáradt repedések kialakulnak, amelyek másrésről a folyáshatártól függnek. Jól ismert, hogy a fáradási határ nem a folyáshatár egy meghatározott hányada minden fémre és ötvözetre, hanem a fáradás szempontjából két további tényezőnek van nagy fontossága, így a deformációs lokalizáltsági foknak és annak a kritikus lokalizált képlékeny deformációnak, amely megindítja a repedés képződését.

A hossz mérethez képesti képlékeny deformációs amplitúdó, vagyis a szokásosan mért mennyiség a monoton vagy a ciklikus feszültség-deformáció görbéken, vagy kis-számú nagy helyi képlékeny deformációból, vagy nagyszámú kismértékű plasztikus alakításból épül fel, két határesetben. Az utóbbi sokkal kedvezőbb a kifáradással szembeni ellenállás szempontjából. Általánosságban megállapíthatjuk, hogy bármilyen finomodás, ami csökkenti a deformáció lokalizáltságát, előnyös a fáradási ellen-

állás szempontjából. A Cr jelenlétében a közönséges 7075-jelű alumínium ötvözetben diszperz eloszlású $\text{Cr}_2\text{Mg}_3\text{Al}_{18}$ összetételű részecskék alakulnak ki hozzávetőlegesen $0,5\text{ }\mu\text{m}$ átmérővel. *Hornbogen* és *Lütjering* megmutatták [26], hogy ezek a finom eloszlású részecskék meggátolják a durva csúszási sávok kialakulását és kb. egyharmadával növelik a fáradási határt. Hasonló eredmény adódott a 2024-típusú alumínium ötvözetekre is [27].

A helyi kritikus képlékeny deformáció, amely a repedés kialakulásához szükséges, szoros kapcsolatban van a bemetszési érzékenységgel. Ha egy anyag erős bemetszési érzékenységet mutat, akkor már egy kis felületi kiemelkedés vagy bemélyedés is elegendő a fáradásos repedés kialakulásához. Gyakran úgy tekintik, hogy a bemetszési érzékenység a folyáshatárral együtt nő, ez azonban nem általános törvény, mivel a bemetszési érzékenységet más tényezők is befolyásolják. A nagyméretű Fe és Si tartalmú zárványok eltávolítása az alumínium ötvözetekből emeli a fáradási határt, amint ezt *Ostermann* és *munkatársainak* a vizsgálata bizonyítja [4]. Az is közismert, hogy a zárványok eltávolítása az acélokban is növeli a fáradási határt. A helyi képlékeny deformációk okozta repedés képződést még alig tanulmányozták, pedig úgy tűnik, hogy ennek a területnek a tanulmányozása fontos és jelentős eredményekkel kecsegtető téma mind a jó fáradási ellenállással rendelkező ötvözetek kialakításában, mind a repedés képződés elméleti modelljeinek a felállításában.

4. A MIKROREPEDÉSEK TERJEDÉSE ÉS ÖSSZEKAPCSOLÓDÁSA

Mivel a fáradt repedésnek egy bizonyos méretet el kell érnie ahhoz, hogy észlelhetővé váljon, így bizonyosra vehető, hogy néhány mikrorepedés már azt megelőzően növekedett, amikor az irodalomban a megjelenéshez szükséges ciklusszámról beszélnek. Az eredmények függenek a vizsgálathoz használt rendszerek felbontóképességétől. A kutatók csak úgy tudják meghatározni egy mikrorepedés kialakulásának pillanatát, ha az valamilyen önkényesen választott méretben megjelenik a minta felületén. Annak meghatározásához, hogy mikor, hol és hogyan alakulnak ki az első fáradt repedések, nagyszámú vizsgálat szükséges a lehető legnagyobb nagyítást használva. Választ kell adni azokra a kérdésekre is, hogy mikor alakul ki egy csúszási sávból egy repedés, milyen a felület alakja és a minta szerkezete a felület közelében közvetlenül a repedés kialakulását megelőzően.

Ha a ciklikus alakítás a fáradási határ feletti feszültséggel vagy képlékeny deformációval történik, a kezdeti mikrorepedések addig növekednek, vagy alakulnak egymásba, amíg egy makrorepedés ki nem alakul. A szokásos szemcseméretű anyagokban a makrorepedést ésszerűen úgy lehet definiálni, hogy területe legyen nagyobb mint több szemcse keresztmetszete, amelyekben kisebb, mikrorepedéseknek definiált repedések találhatók. Egykristályokban 100 és $200\text{ }\mu\text{m}$ közötti repedés átmérő lehet a választóvonal.

Az ma még nem bizonyos, hogy a fáradási határ alatt ciklikusan terhelt anyagokban milyen mennyiségű mikrorepedés alakul ki anélkül, hogy a repedések tovább növekednének. Ez a téma még további tanulmányozást igényel. A kialakult mikrorepedések további növekedését sokféle akadály gátolhatja. Egy zárványban repedés keletkezhet a fázisátalakulási ciklusok alatt, de további növekedését meggátolhatja a zárvány-mátrix határfelület, amint ezt az előző fejezetben már ismertettük. *Chang* és *munkatársai* megmutatták [24], hogy az a feszültség, amely ahhoz szükséges, hogy

a repedés a mátrixban tovább terjedjen nagyobb, mint ami a zárványbeli repedés kialakulásához szükséges. Gyakran észleltek egymástól elkülönült repedéseket zárványokban, mint például alumínium ötvözetekben levő Al_3Cu_2Fe zárványok esetén [22]. Kétfázisú ötvözetekben vagy kompozit anyagokban mikrorepedések alakulhatnak ki a nem-folytonos fázisban, de nem képesek továbbterjedni a folytonos fázisba. A feszültség koncentrációs faktor erősen lecsökken a bemetszéstől, bemaródástól, ároktól vagy más felületi hibától távolodva. Így az a repedés, amely egy felületi hibánál vagy annak közelében alakult ki, nem nőhet tovább egy éppen a fáradási határ alatti névleges feszültség amplitúdó esetén. Ma már jól ismert, hogy a mikrorepedések növekedését a szemcsehatárok akadályozzák [4].

Az irodalomban Ewing és Humfrey vizsgálatai [28] óta ismert, és azóta számos más eredménnyel alátámasztott [4] az a tény, hogy a kialakuló mikrorepedések száma lecsökken a feszültségi vagy a képlékeny deformációs amplitúdó növekedtével. Nagy amplitúdók esetén sok repedés alakul ki, de ezek általában hamarosan összekapcsolódnak a szemcsehatárokon keresztül, így ekkor ez a mikrorepedések növekedésének meghatározó módja. Alacsony feszültségeknél a különálló mikrorepedések növekedésének sokkal nagyobb a jelentősége. A kifáradási határ közelében kialakuló makrorepedésről feltehető, hogy valószínűleg egyetlen forrásból alakult ki. A mikro- vagy makrorepedések terjedésének leírása fémekben általában képlékeny deformációs mechanizmusra alapul, kivéve talán a nagyon rideg szemcsehatárok esetét. Egy kisméretű repedés kezdetben gyakran egy krisztallográfiai sík mentén terjed, az alkalmazott feszültséggel párhuzamosan, ami a Forsyth-féle I. szakaszú repedés terjedésnek felel meg [29]. A terjedő mikrorepedésekkel szemben azért nő az ellenállás a szemcsehatárok közelében, mert a képlékeny deformáció nem-folytonos a szemcsehatárokon keresztül. Egy kiválóan keményített nagyszilárdságú alumínium ötvözetben, amelyet kovácsolással vagy sajtolással szintereltek poralakból, a repedések szemcsehatárban kezdődtek, de a terjedés módja gyorsan átváltozott szemcsén keresztüli növekedésre [4].

A fárasztott mikrorepedések terjedését még viszonylag kevesen vizsgálták, bár a fáradási élettartam egy jelentős hányada erre a szakaszra esik. Megvalósítható elképzelésnek látszik mikrorepedés „gátak” beépítése a mikroszerkezetbe.

5. A MAKROREPEDÉSEK NÖVEKEDÉSE

Ha egy makrorepedés már kialakult, akkor a lineáris törési mechanika ΔK feszültségintenzitási faktora [5, 44] válik a repedésterjedési sebesség kontrollparaméterévé feltéve, hogy a repedés csúcánál csak kismértékű képlékeny alakváltozások történnek. Ciklikus igénybevétel esetén a feszültségintenzitási faktor

$$\Delta K = \Delta \sigma \sqrt{c} f(g), \quad (1)$$

ahol $\Delta \sigma = \sigma_{\max} - \sigma_{\min}$, vagyis a névleges feszültség maximumának és minimumának különbsége, c a repedés hossza és $f(g)$ a minta geometriájától, a terhelési állapotoktól, továbbá a repedés hosszának és a minta szélességének c/w arányától függő függvény. Az $f(g)$ függvény értékét nagyon sokféle állapotra meghatározták és ezeket kézikönyvekben gyűjtötték össze. Szokásos eljárás továbbá a fáradt repedés dc/dN terjedési sebességének (N a fárasztási ciklusok száma) ábrázolása a ΔK faktor függvényé-

ben log-log léptékben egészen addig a tartományig, amelyben a képlékeny alakváltozás már nem tekinthető kicsinynek a repedés csúcánál. Amint a 4. ábrán látható, dc/dN általában három tartományra osztható [30]:

I. Küszöb, vagy küszöbhez közeli tartomány, ahol dc/dN egy ΔK_0 küszöbérték elérése után gyorsan nő ΔK növekedése esetén.

II. Közép tartomány, ahol érvényes a Paris-összefüggés:

$$\frac{dc}{dN} = k(\Delta K)^m, \quad (2)$$

ahol k és m állandók.

III. Nagysebességű tartomány, ahol a maximális feszültségintenzitási faktor, K_{\max} megközelíti a sztatikus törés K_c kritikus feszültségintenzitási faktorát.

A III. tartományt a továbbiakban nem tárgyaljuk, mivel ekkor a fáradt repedés terjedési sebessége olyan nagy, hogy gyakorlatilag már a végső szakadási folyamatok történnek.

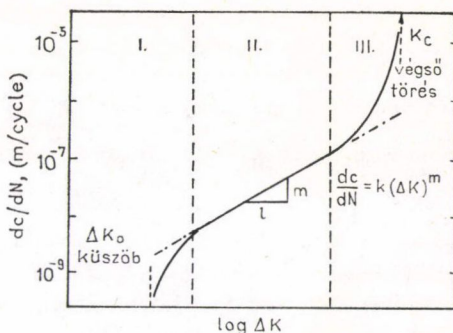
Ennek a három tartománynak a fenomenologikus leírása McEvilytől származik [31], aki a következő empirikus egyenletet állította fel:

$$\frac{dc}{dN} = A'(\Delta K^2 - \Delta K_0^2)(1 + \Delta K/[K_c - K_{\max}]). \quad (3)$$

Ebben az egyenletben a Paris összefüggés m állandójának az $m=2$ kitevő felel meg. Amint azt a későbbiekben elemezni fogjuk, néhány anyag esetén valóban észlelték az $m=2$ értéket, azonban sokkal általánosabb az $m \approx 4$ -hez közeli érték megfigyelése. Természetesen a (3) egyenletet ΔK különböző kitevőinek az esetére módosítani lehet.

5.1. A makrorepedések küszöb vagy küszöbhez közeli növekedése

Tekintsük először a 4. ábra I. tartományát. Ekkor a makrorepedések a ΔK_0 érték alatt nem növekszenek, a ΔK_0 küszöb feszültségintenzitási faktort úgy tekinthetjük, hogy a repedés $\Delta K < \Delta K_0$ feltétel mellett nem-terjedő repedés. ΔK növekedtével a dc/dN sebesség gyorsan nő ΔK_0 -tól kezdődően a Paris-összefüggés tartománya felé. Fine és Ritchie részletesen vizsgálták az I. tartományt [32]. Ma már kellően alátámasztott tény, hogy ΔK_0 a mikroszerkezet függvénye, például ΔK_0 általában növekszik a szemcseméret növekedtével, illetve a folyáshatár csökkenése esetén. Az ilyen tulajdonságokat a tervezőknek számításba kell venniük. A fáradt repedés kialakulásával szembeni ellenállás eléréséhez nagy szilárdság és kis szemcseméret szükséges. Szintén előnyös a kis szemcseméret a mikrorepedések terjedésének elkerülése szempontjából. Viszont a magas ΔK_0 érték eléréséhez durva szemcseszerkezet és alacsony



4. ábra. A fáradásos repedés dc/dN terjedési sebességének vázlatos ábrázolása a ΔK feszültségintenzitási faktor függvényében

szilárdsági tulajdonságok látszanak a legjobbnak. Így a tervező kénytelen kompromisszumos megoldást elfogadni.

Szerencsére létezik néhány kivétel a magas ΔK_0 és az alacsony folyáshatár közti korreláció alól. A legszembetűnőbb példa *Suzuki és McEvily* ferrites-martenzites kettős fázisú, alacsony karbon-tartalmú acélok vizsgálatáról nemrég publikált eredménye [33]. Amikor a mikroszerkezet ferritben levő martenzit szigetekből épült fel, ΔK_0 értéke $8 \text{ MN/m}^{3/2}$ volt, amely tipikus érték sok normalizált vagy edzett acél esetén, amelyeket magas hőmérsékleteken hőkezelték. Azonban, amikor a martenzit volt a folytonos fázis, $\Delta K_0 = 19 \text{ MN/m}^{3/2}$ értéket észleltek annak ellenére, hogy a folyáshatár magasabb, 450 MN/m^2 volt, összehasonlítva a folytonos ferrit 290 MN/m^2 értékével. Ez a reményteljes eredmény arra ösztönözte az acélgyártó cégek vezetőit, hogy fokozzák kutatási erőfeszítéseiket a fáradással szemben jobban ellenálló acélok kifejlesztésére.

A ΔK_0 -ra vonatkozó kísérleti eredményeket a következő fenomenologikus egyenlettel írhatjuk le a különböző mikroszerkezetek esetén [34]:

$$\Delta K_0 \cong \alpha \sigma_s(s)^{1/2}. \quad (4)$$

Az egyenlet felállításakor feltételezzük, hogy ΔK_0 egy olyan feszültséget eredményez a repedés csúcánál, amely éppen elegendő ahhoz, hogy diszlokáció-forrásokat indítson be. Az egyenletben σ_s az a feszültség, amely beindítja a repedés csúcától s távolságra fekvő forrást, míg az α arányossági tényező attól függ, hogy a feszültség koncentrációs faktort milyen mértékben csökkenti a képlékeny alakváltozás a repedés csúcának a közelében. Ennek a faktornak az elméleti meghatározása még nem megoldott. Rögzített ΔK_0 esetén α értéke nagy könnyen alakítható fémekre, míg kis értéket vesz fel törékeny fémekre. Sok esetben, mint például az acélok hőkezelési hőmérsékletének növelésekor, a szilárdság és az alakíthatóság fordított arányosságban állnak egymással. A hőkezelési hőmérséklet csökkenésére bekövetkező ΔK_0 csökkenést, amint ezt *Ritchie* acélban észlelte [35], az α tényező erős csökkenésével lehet megmagyarázni, mivel α csökkenése túlszárnyalhatja a σ_s növekedését. Hőkezelt, rekrisztallizált, egyfázisú ötvözetekben feltételezhető, hogy a diszlokáció-források közti távolság növekszik a szemcsemérettel, ami az előzőekben leírt viselkedést magyarázza. Hasonló módon értelmezhetjük a környezet ΔK_0 -ra gyakorolt hatását is, mivel a feszültségkorrozio csökkenti az alakíthatóságot és az α tényezőt. *Sizuki és McEvily* olyan mikroszerkezet kialakítását javasolták [33], amelyben a ferrit növeli az α tényező értékét, míg a martenzit javítja a szilárdságot.

5.2. A fáradt repedés terjedési sebességének a Paris-összefüggéssel leírható tartománya

Az irodalomban sok elméleti munka foglalkozik a Paris-összefüggésnek megfelelő egyenletek felállításával, így többek között *Weertman* [36], illetve *Mura és Lin* [37] munkája különösen nagy jelentőségű. Arra az elképzelésre alapozva, hogy a plasztikus munka elősegíti a repedés terjedését, a következő egyenletet állították fel:

$$\frac{dc}{dN} = A \frac{(\Delta K)^4}{\mu \sigma_y^2 U}, \quad (5)$$

ahol A egy Jimenziótlan állandó, μ a nyírási modulusz, σ_y a megfelelő folyáshatár és U a plasztikus munka, amely ahhoz szükséges, hogy a repedés keresztmetszete egységnyi területtel növekedjen.

Feltéve, hogy dc/dN arányos a repedés nyílásának kitágulásával, mások [31] a következő egyenletet vezették le:

$$\frac{dc}{dN} = B \frac{(\Delta K)^2}{E\sigma_y}, \quad (6)$$

ahol B egy hosszúság dimenziójú állandó és E a Young-modulusz.

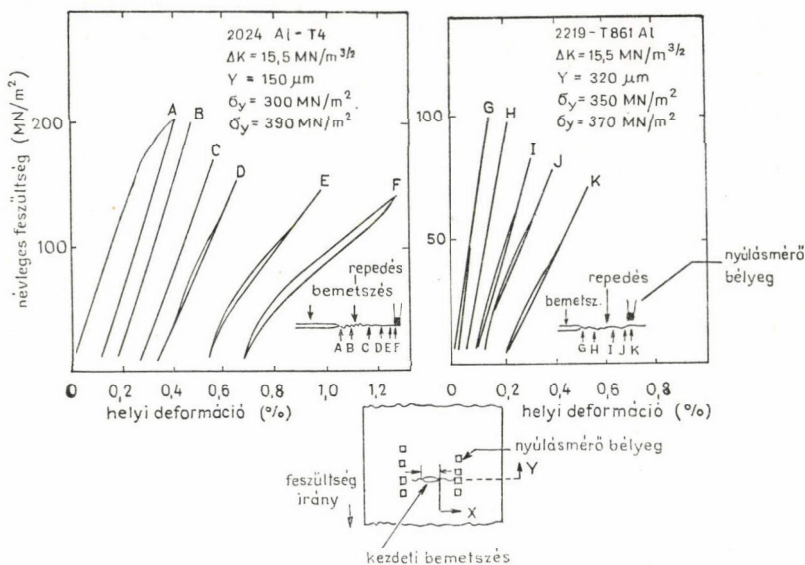
Weertman [36] általánosítva eredeti elképzelését m értékére két határesetként $m=2$ vagy $m=4$ értéket kapott. Az (5) egyenletet érvényesnek találta, bár $m < 4$ esetén megállapította, hogy U függvénye lesz ΔK -nak a következő módon:

$$U = \beta (\Delta K)^{4-m}, \quad (7)$$

ahol β egy arányossági tényező. Amikor $m=4$, U független ΔK -tól, míg $m=2$ esetén U arányos $(\Delta K)^2$ -tel, ekkor az (5) és (6) egyenletek ekvivalensek.

A kísérletileg meghatározott m értékek 2 és 8 között változnak. Frost és munkatársai 14 ötvözetre összegyűjtötték a fáradt repedés terjedési sebességének adatait [38], amelyekből m átlagára 3,94 érték adódott $\pm 0,86$ szórással. Nyolc ötvözetre (négy alumínium, három acél és egy nikkel ötvözet) Izumi, Ikeda és Fine [39, 40] $m=3,7 \pm 0,5$ értéket állapítottak meg. Azonban vannak olyan ötvözetek, amelyekre $m \approx 2$ [31], és ezeket nem vonták be ezekbe az összehasonlításokba. Az $m > 4$ értékek feltehetően annak tulajdoníthatók, hogy ilyenkor az I. vagy a III. tartomány egy részét is beleértették a kiértékelendő adatokhoz. Itt érdemes megjegyezni azt is, hogy kevés kivételtől eltekintve a Paris-összefüggéssel leírható tartományban a repedésterjedés általában II. szakaszú, vagyis ekkor már a repedés terjedésének iránya merőleges az alkalmazott feszültségre.

Az (5) egyenlet ellenőrzésének a céljából Ikeda, Izumi és Fine kidolgozott egy eljárást [40] U mérésére, amelyben $200 \times 210 \mu\text{m}$ méretű, fólia alakú nyúlásmérő bélyegeket ragasztottak a fáradt repedés elé. ΔK értékét $\Delta\sigma$ csökkentésével állandónak tartva, miközben a repedés hossza növekedett, meghatározták a névleges feszültség-helyi deformáció görbéket az elhelyezett nyúlásmérő bélyegek helyén. Néhány tipikus eredményt mutatunk be az 5. ábrán, ahol az X távolságot úgy definiálták, hogy az a mérőfólia középpontjától a repedés csúcspontjáig vett távolság a repedési sík mentén, míg Y a mérőfólia középpontjától a repedés síkjáig mért távolság. Az ábrán egy sorozat névleges-feszültség helyi-deformáció görbe látható csökkenő X -ek mellett, két különböző Y érték esetén. A kezdeti A és G görbék nem záródnak, míg a továbbiak első közelítésben hurkokat alkotva zárulnak. A nem-záruló görbe maradandó deformációt jelez, amely elhanyagolhatóan kicsinnyé válik az első ciklus után. A görbéket önkényesen jobbra toltuk el a deformációs tengely mentén, így jól elkülönülnek egymástól. Amikor a nyúlásmérő bélyegeket a repedés csúcától távol helyezték el, így a B és a H görbe esetén, a hiszterézis hurkok szélessége túl kicsi ahhoz, hogy az ábrázolt mértékben látni lehessen azokat. A D görbe enyhe hiszterézist mutat, ami az X távolság csökkenésével növekszik, amint ezt az E , F , I és J hurkok mutatják. Amint a repedés eléri a nyúlásmérő bélyeget, az elszakad. Amikor Y elegendően nagy, a repedés kikerüli a nyúlásmérőt, a K egy ilyen hurok.



5. ábra. Tipikus névleges-feszültség helyi-deformáció görbék a repedési csúcstól mért távolság függvényében. Az A—F és G—K távolság kb. 2 mm, míg a bemetszés 3 mm hosszú és 0,2 mm széles volt. $R=0,05$

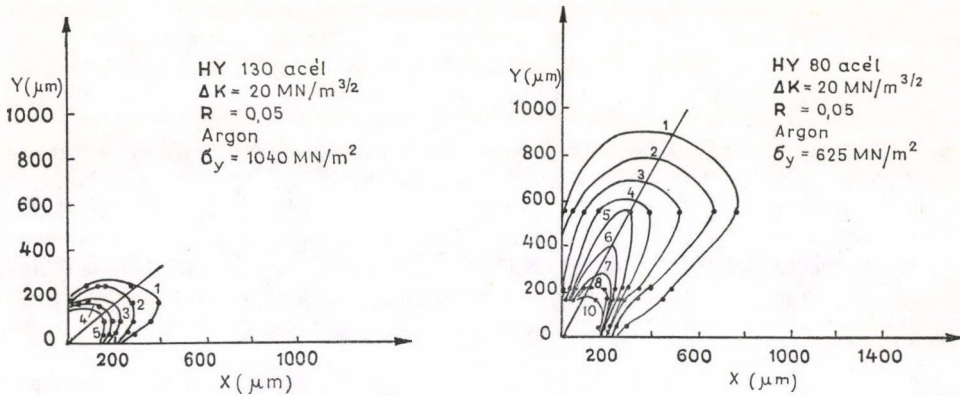
Az U meghatározásához sokkal inkább a helyi feszültségre, mint a névleges feszültségre van szükség. Ez bemetszés nélküli mintákon felvett feszültség-deformációs hurkokból határozható meg, ahol a deformációs amplitúdót szintén az előzőekben használt nyúlásmérő bélyegek segítségével határozhatjuk meg.

Az U plasztikus munka két részből épül fel: a hiszterézis szerinti U^h és a marandó U^m részből. Az utóbbit különböző ötvözetekre megmérve azt találták, hogy az a teljes U -nak kevesebb mint 1%-a. Így, mivel az U fő összetevője a hiszterézises tag, a hurkok területének meghatározása a legfontosabb.

A helyi-feszültség helyi-deformációs hiszterézis görbékből az egységnyi területű repedésterjedésre eső helyi plasztikus munkát az X és Y koordinátájú képlékeny zónában a következő módon határozhatjuk meg:

$$U_{XY} = \frac{\int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} \sigma_f d\varepsilon - \int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} \sigma_a d\varepsilon}{dc/dN}, \quad (8)$$

ahol σ_f és σ_a a helyi feszültségek felső és alsó görbéinek megfelelő értékek a hiszterézis hurkokon. Mivel a vizsgálatot állandó ΔK mellett végezték, a törésmechanikából jól ismert módon egy azonos állapotú képlékeny zóna halad együtt a repedés csúcsával. Így a képlékeny zónáról a szintvonalas ábrázoláshoz hasonlóan egy térkép készíthető, feltüntetve az azonos U_{XY} értékeket összekötő vonalakat, amint ez a 6. ábrán HY80 és HY130 jelű nagynyomású csőacélok vizsgálata esetén látható. A képlékeny zónák lepkészárny alakúak összhangban azzal, hogy a maximális nyírási feszültség



6. ábra. A képlékeny zónák „szintvonalas” térképe $\Delta K = 20 \text{ MN/m}^{3/2}$ mellett, nagynyomású csőacélok esetén, melyek összetétele és előlétele HY80 (0,16 t% C, 3 t% Ni, 1,5 t% Cr, 0,4 t% Mo; hőkezelés: 700 °C, 1 óra) és HY130 (0,10 t% C, 3 t% Ni, 0,5 t% Cr, 0,45 t% Mo, 0,10 t% V; hőkezelés: 600 °C, 1 óra) volt. A „szintvonalak” azonos U_{XY} helyi plasztikus munka értékeket kötnek össze, amelyek egymástól azonos, 10^{11} J/m^4 egységekre fekszenek, és amit a vonalakon levő számok jeleznek

45°-os szöget zár be a terhelés irányával, illetve a repedési síkkal. A képlékeny zóna mérete a folyáshatár csökkenésével nő.

A teljes plasztikus munkát a képlékeny zónára vett integrálással kaphatjuk meg:

$$U = \iint U_{XY} dX dY. \quad (9)$$

Davidson és Lankford egy másik módszert dolgozott ki U mérésére [41], amelyben electron channeling segítségével mérték az elemi cella méretét 0,05% C-et tartalmazó acélban a repedéstől mért távolság függvényében. A hiszterézis hurok területeket bemetszés nélküli mintákon határozták meg egy kalibrált cellaméret-hurok terület ábrázolás segítségével. Összehasonlítva U járulékát a repedés csúcsától 100 μm -en belül ugyanarra az alacsony karbon tartalmú acélra mindkét módszer segítségével [4] nagyon jó egyezés adódik, a két érték 15%-on belül egyezik.

Az U plasztikus munkára, valamint a további fontos paraméterekre kapott mérési eredményeket Fine gyűjtötte össze [4] 17 különböző ötvözet esetén. Az (5) egyenletben szereplő A „állandó” átlagértékére: $2,9 \times 10^{-3} \pm 1,1 \times 10^{-3}$ adódott. Mura és Villman elméleti vizsgálataik [42] alapján $A = 2 \times 10^{-3}$ értéket állapítottak meg, amely közelíti az átlagos kísérleti értéket. Megjegyezzük, hogy az (5) egyenletben szereplő további mennyiségek (σ_y , μ , dc/dN , ΔK , U) szórása a vizsgált ötvözetekre rendkívül nagy, míg az A „állandó” szórása viszonylag kicsiny. Meg kell említeni természetesen, hogy a felhasznált adatok olyan ötvözetekre vonatkoznak, amelyek esetén az m érték 3-tól 4,5-ig változott, és a 0,2%-os ciklikus folyáshatár többlet nem tekinthető szigorúan véve korrekt folyáshatárnak az (5) egyenletben, továbbá az U mennyiség mérési hibája sem elhanyagolható [39, 40]. Az utóbbi két tény az A értékében is hibákat eredményez.

A következőkben ΔK -nak az U -tól való függését vizsgáljuk meg. Mint már említettük, amikor $m=4$, az U függetlennek tekinthető ΔK -tól. Ezt acélban [40] és különböző alumínium ötvözetekben [39] vizsgálták. Az észlelt eltérés a mérési hibán belül-

linek tekinthető. Amikor $m < 4$, ΔK -ról elméletileg feltehető, hogy az U függvénye, miközben az (5) egyenlet érvényes marad. Az $m \approx 2$ kitevőre vezető mérések közül figyelemre méltó Rolfe és Barsom vizsgálata [43], amelyben martenzites acélokra nagyszámú vizsgálati adatból $m = 2,25$ értéket állapítottak meg.

Kwun és Fine [4] $m = 2,3$ kitevőt észleltek egy MA 87 P/M jelű alumínium alapú ötvözetben, amely 6,5t% Zn-et, 2,5t% Mg-ot, 1,5t% Cu-et és 0,4t% Co-ot tartalmazott, és amelyet 25 órán át 120 °C-on, majd 4 órán át 163 °C-on hőkezelték. Két különböző ΔK mellett (10 és 17 MN/m^{3/2}) mérték U -t, ellenőrizve a (7) egyenletet. Az U -ra mért eredmény 1,7 × 10⁴, illetve 4,3 × 10⁴ J/m² volt, amit az (5) egyenletbe behelyettesítve A értékére 2,2 × 10⁻³, illetve 2,3 × 10⁻³ adódott, melyek az előzőekben említett, 17 ötvözetre vett átlagértékhez közeli eredmények. Ahhoz, hogy a vizsgált két ΔK esetén észlelt U plasztikus munkák aránya a mért 2,5 legyen, az U mennyiséget $(\Delta K)^{1,7}$ -nel kell arányosnak tekinteni.

A fentiek azt bizonyítják, hogy a fáradt repedés egységnyi területnövekedéssel történő terjedéséhez szükséges plasztikus munka fontos anyagi paraméter, amely a folyáshatárral együtt meghatározza a fáradt repedés terjedési sebességét. Állandó ΔK esetén a dc/dN sebesség fordított arányosságot mutat a $\mu U(\sigma'_y)^2$ mennyiséggel. Az azonos fő alkotóelemekből álló ötvözetekre μ csak kismértékben változik az ötvöztetés hatására, így az $U(\sigma'_y)^2$ szorzat a meghatározó.

Sok kísérleti munkában észlelték, hogy a folyáshatár növekedése egy ötvözetrendszerben, mint például acélokban a hőkezelési hőmérséklet változtatására csak kismértékben változtatja meg a dc/dN terjedési sebességet állandó ΔK mellett. Ezt az magyarázza, hogy U és σ'_y ellentétes módon változnak. Mivel U részben a képlékeny zóna méretétől függ, így az ötvözet szilárdságának növekedtével U csökkenése várható.

Vannak kivételek, amikor U nem áll fordított arányosságban $(\sigma'_y)^2$ -tel. Nb tartalmaz, nagy szilárdságú, alacsony ötvöztartalmú acélban, amelyet edzés után 400 °C-on hőkezelték, a mért U érték nagyon magas az ötvözet folyáshatárához és alacsony repedés-terjedési sebességéhez képest [4]. Kétalkotós Al—6,3t% Cu ötvözetben, amelyet szobahőmérsékleten GP zónákra öregítettek, szintén magas U értéket értek el egyéb alumínium ötvözetekhez képest [39]. A deformációs lokalizáltság megakadályozása bizonyos esetekben fontos módszer U megnövelésére. Ha a képlékeny deformáció lokalizált, akkor jogosan várható kicsiny U érték. Az Al—6,3t% Cu ötvözet többlet rezet tartalmaz, amely 5—10 μm méretű gömb alakú CuAl₂ részecskéket eredményez egyenletes diszperzitással a mátrixban. Ezek megakadályozzák a deformáció lokalizáltságát, ami a csak Guinier—Preston zónákat tartalmazó ötvözetet jellemzi.

A fáradt repedés terjedési sebességének korrozív közeg okozta gyorsító hatását is meg lehet érteni az U paraméter változása alapján. Davidson és Lankford [41] mérték a fáradt repedés terjedési sebességét és az U plasztikus munkát száraz és nedves levegőben. A nedves levegőben a nagyobb sebesség együtt járt az U csökkenésével.

A fentiek azt valószínűsítik, hogy a fáradásos repedések terjedésével szemben jobban ellenálló ötvözeteket állíthatunk elő, ha ismereteinket tovább gyarapítjuk az U plasztikus munkáról, a repedések keletkezését okozó képlékeny deformációs folyamatokról, illetve ezek mikroszerkezettel való kapcsolatáról.

6. ÖSSZEFOGLALÁS

A dolgozatban megvizsgáltuk, hogy milyen lépésekkel írható le egy fáradásos törés „története”. A ciklikus terhelés kezdeti szakaszában a mozgó diszlokációk általában csúszási sávokat, illetve ahogy ezek a felületre érnek, felületi durvulást, kiemelkedéseket és bemélyedéseket hoznak létre. Később többnyire ezen csúszási sávok mentén jelennek meg az első mikrorepedések, amelyek növekedéssel, vagy összekapcsolódással makrorepedésekké alakulhatnak. Megvizsgáltuk továbbá a makrorepedések létrejöttének és továbbterjedésének a feltételeit. Megállapítottuk, hogy kezdetben a repedések általában a csúszási síkban, a húzófeszültség irányában terjednek (I. szakaszú repedés-terjedés), míg a nagyobb képlékeny deformációk elérése után a repedésterjedés iránya merőleges az alkalmazott feszültségre (II. szakaszú terjedés).

Részletesen vizsgáltuk a makrorepedések küszöb feszültségintenzitását, vagy küszöbhoz közeli növekedését, továbbá a fáradt repedések terjedésének Paris-összefüggéssel leírható tartományát. Ekkor figyelmünket főként az U plasztikus munka hatására összpontosítottuk, amelyről megállapítottuk, hogy a fáradásos repedések terjedésének fontos anyagi paramétere, és további részletesebb mikroszerkezeti vizsgálata szükséges ahhoz, hogy jobb fáradási ellenállású anyagokat tudjunk előállítani, illetve a fázistás közben lejátszódó mikroszerkezeti folyamatokat mélyebben megértsük.

A kifáradással szembeni ellenállást növelni lehet a fáradásos törés kialakulásáig lejátszódó folyamatok minden lépésében. Így megvizsgáltuk, hogyan akadályozható meg a mikrorepedések megjelenése, hogyan gátolható a terjedésük, illetve összekapcsolódásuk milyen módon fékezheti le a makrorepedések kialakulását, továbbá milyen mechanizmusokkal lassítható a repedések terjedése. Megállapítottuk, hogy sokféle kifáradást gátló eszköz áll rendelkezésünkre, azonban ezek legtöbbször ellentétesen hatnak az egyes lépésekben, vagyis előfordul, hogy valamely szakaszban gátolják, máskor viszont elősegítik a repedések növekedését. Ezeket a hatásokat együttesen kell a tervezőknek figyelembe venni, hogy optimális fáradási ellenállású anyagokat állítsanak elő. E cél elérése azonban még jelentős további kutatásokat igényel.

IRODALOM

1. W. J. M. Rankine, Institution of Civil Engineers, Minutes of Proceedings, 3, 105, 1843.
2. A. Wöhler, Z. Bauw. 8, 642, 1858.
3. Honyek Gy., Magyar Fizikai Folyóirat, 28, 105, 1980.
4. M. E. Fine, Met. Trans. 11A, 365, 1980.
5. Sáray I., Magyar Fizikai Folyóirat, 28, 117, 1980.
6. P. J. E. Forsyth, Acta Met. 11, 703, 1963.
7. Kovács I., Magyar Fizikai Folyóirat, jelen cikksorozat.
8. Honyek Gy., Magyar Fizikai Folyóirat, jelen cikksorozat.
9. C. Laird, Treatise on Materials Science and Technology, Vol. 6. Plastic Deformation of Materials, ed. R. J. Arsenault. Academic Press, N. Y. 1975. p. 101.
10. J. C. Grosskreutz and H. Mughrabi, Constitutive Equations in Plasticity, ed. A. S. Argon, M. I. T. Press, Cambridge, Mass. 1975. p. 251.
11. D. Kuhlmann—Wilsdorf and C. Laird, Mat. Sci. Eng. 27, 137, 1977.
12. C. Laird, Mat. Sci. Eng. 22, 231, 1976.
13. K. Katagiri, A. Omura, K. Koyanagi, J. Awatani, T. Shiraishi and H. Kaneshiro, Met. Trans., 8A, 1769, 1977.
14. H. Mughrabi, Strength of Metals and Alloys, ed. P. Haasen, Vol. 3. Pergamon Press, Oxford, 1980. p. 1615.
15. W. Vogel, Doctorate Thesis, Stuttgart University, 1978.
16. W. Vogel, M. Wilhelm and V. Gerold, Proc. of 5th Int. Conf. on the Strength of Metals and Alloys, Aachen, 1979.
17. W. H. Kim and C. Laird, Acta Met. 26, 777, 789, 1978.
18. H. Mughrabi, Z. Metallk. 66, 719, 1975.
19. H. Mughrabi, Surface Effects in Crystal Plasticity, eds. R. M. Latanision and J. T. Fourie, Noordhoff, Leyden, 1977. p. 479.
20. A. J. McEvily, R. L. Snyder and J. B. Clark, Trans. Met. Soc. AIME, 227, 452, 1963.
21. E. A. Starke and G. Lütjering, Fatigue and Microstructure, Proc. of ASM Materials Science Seminar, St. Louis, Missouri, 1979. p. 205.
22. C. Y. Kung and M. E. Fine, Met. Trans. 10A, 603, 1979.

23. *W. L. Morris and M. R. James*, *Met. Trans.* *11A*, 856, 1980.
24. *R. Chang, W. L. Morris and O. Buck*, *Scr. Met.* *13*, 191, 1979.
25. *N. M. A. Eid and P. F. Thomason*, *Acta Met.* *27*, 1239, 1979.
26. *E. Hornbogen and G. Lütjering*, *Proc. 6th Int. Conf. on Light Metals*, Loeben/Vienna, Aluminium-Verlag, Düsseldorf, 1975. p. 40.
27. *G. Lütjering, H. Döcker and D. Munz*, *Proc. 3rd Int. Conf. on Strength of Metals and Alloys*, Cambridge, England, 1973. p. 427.
28. *J. A. Ewing and J. C. W. Humfrey*, *Phil. Trans. Roy. Soc.* *200*, 241, 1903.
29. *P. J. E. Forsyth*, *The Physical Basis of Metal Fatigue*, Blackie, London, 1969.
30. *C. J. Beevers, R. J. Cooke, J. F. Knott and R. O. Ritchie*, *Metal Sci.* *9*, 119, 1975.
31. *A. J. McEvily*, *The Microstructure and Design of Alloys*, *Proc. 3rd Int. Conf. on the Strength of Metals and Alloys*, Cambridge, England, 1973. p. 20.
32. *M. E. Fine and R. O. Ritchie*, *Fatigue and Microstructure*, *Proc. of ASM Materials Science Seminar*, St. Louis, Missouri, 1979. p. 245.
33. *H. Suzuki and A. J. McEvily*, *Met. Trans.* *10A*, 475, 1979.
34. *M. E. Fine*, *Thresholds for Fatigue Failure*, *Proc. Fall Meeting of Japan Inst. of Metals*, Nagoya, Japan, 1979.
35. *R. O. Ritchie*, *J. Eng. Mat. and Tech.*, *Trans. ASME*, *99*, 195, 1977.
36. *J. Weertman*, *Fatigue and Microstructure*, *Proc. of ASM Materials Science Seminar*, St. Louis, Missouri, 1979. p. 279.
37. *T. Mura and C. T. Lin*, *Int. J. Fract.* *10*, 284, 1974.
38. *N. E. Frost, K. J. Marsh and L. P. Pook*, *Metal Fatigue*, Clarendon Press, Oxford, 1974. p. 212.
39. *Y. Izumi and M. E. Fine*, *Eng. Fract. Mech.* *11*, 791, 1979.
40. *S. Ikeda, Y. Izumi and M. E. Fine*, *Eng. Fract. Mech.* *9*, 123, 1977.
41. *D. L. Davidson and J. Lankford*, *Proc. Symp. Environment Sensitive Fracture of Engineering Materials*, TMS-AIME, 1977.
42. *T. Mura and C. Villman*, *J. Appl. Mech. of ASME*, *79*, 26, 1979.
43. *S. T. Rolfe and J. M. Barsom*, *Fracture and Fatigue Control in Structures*, eds. *N. M. Newmark and W. J. Hall*, Prentice-Hall Inc. Englewood, N. J. 1977.
44. *Kovács I.*, *Magyar Fizikai Folyóirat*, jelen cikksorozat.

A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó és Nyomda főigazgatója

Műszaki szerkesztő: Sándor István

A kézirat a nyomdába érkezett: 1984. július 8. — Terjedeleme: 10,15 (A/5) iv
85-3802 — Szegedi Nyomda, Szeged — F. v.: Dobó József igazgató

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADEMIA
KÖNYVTÁRA

TARTALOMJEGYZÉK

A KÉPLÉKENY ALAKVÁLTOZÁS MECHANIZMUSAI II.

Szerkesztő

KOVÁCS ISTVÁN

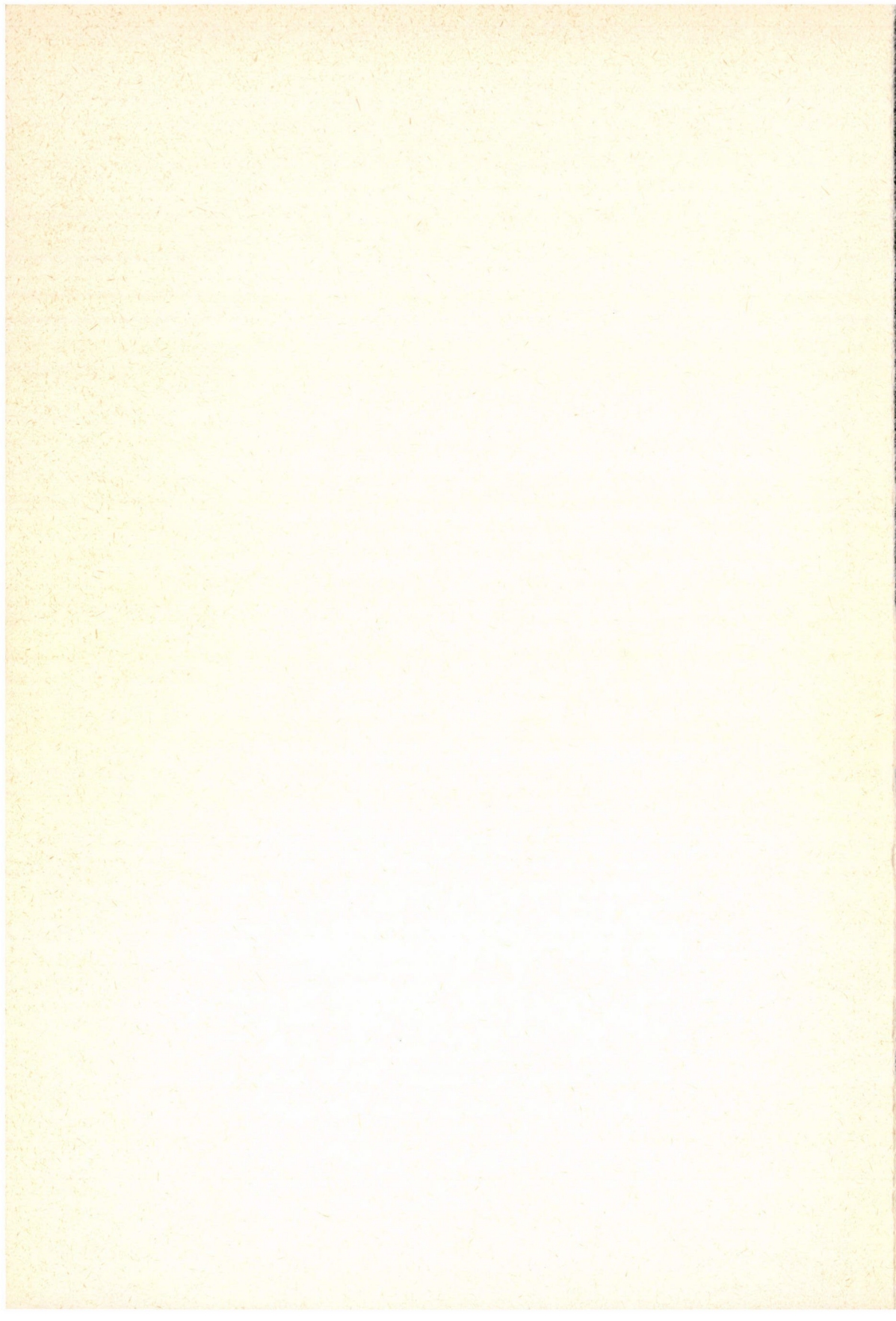
ELTE, Általános Fizika Tanszék

7. Tasnádi Péter: A kúszás mikromechanizmusai	463
8. Bérces György: A Portevin — Le Chatelier effektus	481
9. Vörös György: Nagysebességű képlékeny alakváltozások	509
10. Juhász András: Szuperképlékenység	521
11. Rajkovits Zsuzsa: Deformációs ikresedés felületcentrált köbös fémekben	537
12. Kovács István: Repedésképződés és törés	551
13. Honyek Gyula: Fáradásos törés	563

NÉVMUTATÓ

a Magyar Fizikai Folyóirat 32. kötetéhez

<i>Bérczes György</i> : Ponthibák rácsmodellje	293
<i>Bérczes György és Kovács István</i> : Vakanciák és vakanciakomplexek kétalkotós ötvözetekben	333
<i>Bánkuti József és Kirschner István</i> : A15 típusú szupravezetők	171
<i>Csernai László</i> : Relativisztikus nehéz-ion ütközések hidrodinamikai leírása	231
<i>Forgács Gábor</i> : Kritikus jelenségek sztatikájának és dinamikájának vizsgálata a renormalizációs csoport segítségével	189
<i>Fodor Ilona</i> : Az izobár analóg állapotok finomszerkezete	29
<i>Főzy István</i> lásd <i>Tasnádi Péter</i>	
<i>Főzy István</i> lásd <i>Juhász András</i>	
<i>Harsányi László</i> : Piridin bázisok egyensúlyi geometriájának, erőterének és infravörös szinképének számítása a CNDO/2 erőmódszerrel	483
<i>Illy Judit</i> : Vakanciák kondenzációja	355
<i>Juhász András, Tasnádi Péter és Főzy István</i> : Szemcsehatár szerkezetek fizikai modelljei	437
<i>Juhász András</i> lásd <i>Tasnádi Péter</i>	
<i>Kirschner István</i> lásd <i>Bánkuti József</i>	
<i>Kovács István</i> lásd <i>Bérczes György</i>	
<i>Kovács István és Vörös György</i> : Kristályhibák kontinuum modelljei	383
<i>Lendvai János</i> : Kiválások és ötvöző atomcsoportok deformációi	371
<i>Lovas István</i> lásd <i>Sailer Kornél</i>	
<i>Margaritisz Tanaszisz</i> : Magasabb rendű sugárzási korrekciók számolása hyperonok β -bomlásához a Glashow—Weinberg—Salam elméletben	105
<i>Németh Judit</i> lásd <i>Sailer Kornél</i>	
<i>Rajkoviits Zsuzsa</i> : Szemcsehatár szegregáció	457
<i>Sailer Kornél, Németh Judit és Lovas István</i> : Pion-kondenzált normál állapotú, anizotrop anyag fázisegyensúlya	1
<i>Sáray István</i> : A plazmaszórás fizikai alapjai	469
<i>S. Tóth László</i> : Ponthibák és empirikus potenciálok	319
<i>Tasnádi Péter, Juhász András és Főzy István</i> : Szemcsehatár szerkezetek geometriai modelljei	425
<i>Tasnádi Péter</i> lásd <i>Juhász András</i>	
<i>Vörös György</i> lásd <i>Kovács István</i>	
<i>Wirth Lajos</i> : Elektrohídrodinamikai hullámok nagy intenzitású sztatikus elektromos térben	179



TÁRGYMUTATÓ

a Magyar Fizikai Folyóirat 32. kötetéhez

<i>Sailer Kornél, Németh Judit és Lovas István: Pion-kondenzált normál állapotú, anizotrop anyag fázisegyensúlya</i>	1
<i>Fodor Ilona: Az izobár analóg állapotok finomszerkezete</i>	29
<i>Margaritisz Tanaszisz: Magasabb rendű sugárzási korrekciók számolása hyperonok β-bomlásához a Glashow—Weinberg—Salam elméletben</i>	105
<i>Bánkuti József és Kirschner István: A15 típusú szupravezetők</i>	171
<i>Wirth Lajos: Elektro-hidrodinamikai hullámok nagy intenzitású sztatikus elektromos térben</i> ...	179
<i>Forgács Gábor: Kritikus jelenségek sztatikájának és dinamikájának vizsgálata a renormalizációs csoport segítségével</i>	189
<i>Csernai László: Relativisztikus nehéz-ion ütközések hidrodinamikai leírása</i>	231
<i>Bérczes György: Ponthibák rácsmodellje</i>	293
<i>S. Tóth László: Ponthibák és empirikus potenciálok</i>	319
<i>Bérczes György és Kovács István: Vakanciák és vakanciakomplexek kétalkotós ötvözetekben</i> ...	333
<i>Illy Judit: Vakanciák kondenzációja</i>	355
<i>Lendvai János: Kiválások és ötvöző atomcsoportok deformációi</i>	371
<i>Kovács István és Vörös György: Kristályhibák kontinuum modelljei</i>	383
<i>Tasnádi Péter, Juhász András és Főzy István: Szemcsehatár szerkezetek geometriai modelljei</i> ...	425
<i>Juhász András, Tasnádi Péter és Főzy István: Szemcsehatár szerkezetek fizikai modelljei</i>	437
<i>Rajkovits Zsuzsa: Szemcsehatár szegregáció</i>	457
<i>Sáray István: A plazmaszórás fizikai alapjai</i>	469
<i>Harsányi László: Piridin bázisok egyensúlyi geometriájának, erőterének és infravörös színeképének számítása a CNDO/2 erőmódszerrel</i>	483

